




МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП


Капустина А.А.
(подпись) (ФИО)



УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой общей, неорганической и
элементоорганической химии

Капустина А.А.
(подпись) (ФИО.)

«29» января 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики

Направление подготовки 04.03.01 Химия

профиль «Фундаментальная химия»

Форма подготовки очная

курс 2,3 семестр 4,5

лекции 52 часов

практические занятия 60 час.

лабораторные работы ____ час.

в том числе с использованием МАО лек. __30__ /пр. ____ /лаб. ____ час.

в том числе в электронной форме лек. ____ /пр. ____ /лаб. ____ час.

всего часов аудиторной нагрузки 112 час.

в том числе с использованием МАО_18__ час.

в том числе в электронной форме ____ час.

самостоятельная работа 104 час.

в том числе на подготовку к экзамену 72 час.

контрольные работы -5

курсовая работа / курсовой проект ____ - ____ семестр

зачет ____ семестр

экзамен 4,5 семестры

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями с требованиями Федерального образовательного стандарта, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ 17.07.2017 г. №671.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры Общей, неорганической и элементоорганической химии ШЕН протокол № 4 от «15» января 2020 г.

Заведующая кафедрой

Общей, неорганической и элементоорганической химии ШЕН к.х.н., доцент Капустина А.А.

Составители: к.х.н., доцент Капустина А.А., Савченко В.Г.

Владивосток

2020

Оборотная сторона титульного листа РПУД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

Дисциплина «Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики» разработана для студентов направления 04.03.01-Химия, профиль «Фундаментальная химия» в соответствии с ФГОС ВО 3++ по данному направлению. Входит в обязательную часть учебного плана: Б1.О.10.03. Трудоемкость дисциплины 6 зачетных единиц (216) часов. Дисциплина включает 52 часа лекций, 60 часов практических занятий и 104 часа самостоятельной работы, в том числе 72 часа на подготовку к экзамену. Реализуется в 4 и 5 семестрах. Оба семестра завершаются экзаменом.

I. Цели и задачи дисциплины:

Цель: формирование у студентов знаний об основах строения вещества, методах его экспериментального и теоретического изучения, взаимосвязи строения и свойств химических веществ, формирование химического мышления, умения использовать полученные знания в профессиональной деятельности.

Задачи:

1. Сформировать знания теоретических основ учения о строении химических частиц.

2. Сформировать умение использовать свойства веществ для установления их строения и решать обратную задачу.

3. Познакомить с методами расчета энергии молекулы.

Для освоения данной дисциплины у студентов должны быть сформированы следующие предварительные компетенции: умение использовать знания по неорганической, органической, физической химии, физике для объяснения строения молекул; умение объяснять взаимосвязь строения и свойств молекул.

В результате изучения данной дисциплины у студентов формируются следующие общепрофессиональные компетенции:

Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Наименование категории (группы) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
--	---	---

Общепрофессиональные навыки	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, связанных со строением и свойствами вещества; ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение, вычислительную технику при решении задач, связанных со строением атомов и молекул:
Физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	ОПК-4 Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при обработке результатов, связанных со строением и химической активностью молекул ОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик ОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений о строении атомов и молекул

Для реализации данных компетенций используются следующие методы активного обучения: лекции-беседы, лекции с разбором конкретных ситуаций.

I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики (18 часов).

Раздел 1. Основные постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Простейшие задачи (9 часов).

Тема 1. Волновая функция, состояние (2 часа).

Вероятность нахождения квантовой системы в элементе конфигурационного пространства. Плотность вероятности нахождения квантовых частиц в пространстве. Условие нормировки волновой функции. Требования к волновой функции.

Тема 2. Формализм квантовой механики, операторы (1 час).

Операторы физических величин. Собственные значения и собственные функции операторов. Спектр оператора. Вырожденные состояния, кратность вырождения. Среднее значение физической величины. Принцип

суперпозиции состояний. Принцип неопределенности Гейзенберга. Соотношения неопределенностей для координаты и импульса.

Тема 3. Уравнение Шредингера (1 час).

Уравнение Шредингера. Стационарные состояния. Стационарное уравнение Шредингера. Общий вид гамильтониана молекулы. Основное состояние.

Тема 4. Приближенные методы решения квантово-механических задач (1 час).

Вариационный принцип. Вариационный метод Ритца. Теория возмущений.

Тема 5. Простейшие задачи квантовой механики (2 часа).

Решение уравнения Шредингера для частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (энергетические уровни, волновая функция частицы, плотность вероятности нахождения частицы в пространстве между стенками). Частица в потенциальном ящике. Модель свободных электронов для сопряжённых полиенов. Туннельный эффект.

Тема 6. Волновая функция атома водорода (2 часа).

Гамильтониан водородоподобного атома. Разделение переменных. Радиальная функция. Сферические гармоники. Квантовые числа водородоподобного атома. Узловые точки и узловые поверхности. Радиальная функция распределения. Энергетические уровни водородоподобного атома.

Раздел 2. Многоэлектронный атом; приближенные методы решения квантово-механических задач (5 часов).

Тема 1. Многоэлектронный атом (1 час).

Гамильтониан многоэлектронного атома. Приближение независимых частиц. Эффективный потенциал. Метод самосогласованного поля. Уравнения Хартри. Энергия в методе Хартри.

Тема 2. Метод Хартри-Фока (2 часа).

Антисимметричность электронной волновой функции. Спин-орбиталь. Детерминант Слетера. Уравнения Хартри-Фока. Основный, кулоновский и обменный интегралы. Природа обменного взаимодействия. Общая схема решения уравнений Хартри-Фока. Понятия ограниченного и неограниченного метода Хартри-Фока. Приближение центрального поля. Классификация АО. Физический смысл орбиталей Хартри-Фока. Теорема Купманса.

Тема 3. Электронная корреляция (1 час).

Методы учета корреляционной энергии: метод конфигурационного взаимодействия, метод связанных кластеров, метод теории возмущений Меллера-Плессета, общие принципы и сравнительная характеристика.

Тема 4. Теория функционала плотности (1 час).

Теорема Хоэнберга-Кона. Полная энергия квантовой системы. Представление кинетической энергии в ТФП, орбитали Кона-Шэма. Обменные и корреляционные функционалы. Приближения LDA и GGA. Гибридные функционалы.

Раздел 3. Квантовая химия молекул и теория химической связи (2 часа).

Тема 1. Гамильтониан молекулы (1 час).

Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронная волновая функция. Критерий применимости приближения Борна-Оппенгеймера.

Тема 2. Метод молекулярных орбиталей (1 час).

Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Метод Рутаана на примере молекулы водорода. Образование связывающей и разрыхляющей молекулярных орбиталей. Распределение электронной плотности для молекулярных связывающей и разрыхляющей орбиталей молекулы H_2 . Зависимость полной, кинетической и потенциальной энергий от межъядерного расстояния в молекуле H_2 .

Раздел 4. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ); пути и энергетика химической реакции (2 часа).

Тема 1. Поверхность потенциальной энергии (1 час).

Потенциальная энергия двухатомной молекулы. Понятие ППЭ. Стационарные точки ППЭ. Гессиан. Координата реакции. Путь минимальной энергии. Седловая точка. Переходное состояние. Энергия активации.

Тема 2. Колебания молекул (1 час).

Модель гармонического осциллятора для молекулы. Силовые постоянные. Частоты нормальных колебаний. Энергия нулевых колебаний. Расчет термодинамических функций.

Модуль 2. Строение вещества (34 часа).

Раздел 1. Введение. Классические и квантово-механические теории строения молекул. (8 час.).

Тема 1. Теоретические основы учения о строении химических частиц Работы Франкланда, Купера, Кекуле, А.М. Бутлерова. (1 час.).

Тема 2. Основы современной теории химического строения (1 час.).

Потенциальная кривая. Равновесное состояние. Энергия (полная и диссоциации) молекулы. Интерпретация направленности химических связей.

Тема 3. Теория отгалкивания электронных пар валентной оболочки (2 час.), в том числе с использованием MAO-лекция – беседа (2 часа).

Основные положения теории Гиллеспи. Применение теории для определения геометрического строения молекул.

Тема 4. Приближенные методы решения волнового уравнения (4 час.), в том числе с использованием MAO-лекция – беседа (2 часа).

Гетеронуклеарные двухатомные молекулы в МО ЛКАО. Расчет энергии. Построение энергетических диаграмм. Симметрия молекулярных систем. Точечные группы симметрии молекул. Представления и характеры представлений точечных групп. Использование симметрии молекул для построения молекулярных орбиталей

Многоатомные молекулы в методе МО. Понятие о делокализованных и

локализованных МО. Явление внутреннего вращения. Потенциальные барьеры. Конформеры.

Раздел 2. Геометрия молекул. Энергетическая характеристика молекул. (6час.).

Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях (2час.), в том числе с использованием MAO-лекция с разбором конкретных ситуаций (2 часа).

Принцип Вудворда и Гоффмана. Перциклические реакции. Супра- и антароповерхностные реакции.

Тема 2. Метод МО Хюккеля (2час.), в том числе с использованием MAO-лекция – беседа (2 часа).

Основные положения метода МО Хюккеля. Применение его к диеновым и ароматическим соединениям. Понятия: электронная плотность, заряд на атомах, порядок связи, индекс свободной валентности. Энергия диссоциации и энергия делокализации.

Тема 3. Диаграммы Уолша (2час.), в том числе с использованием MAO-лекция с разбором конкретных ситуаций (2 часа).

Подход Уолша к определению строения молекул. Диаграммы Уолша для молекул состава AB_2 и AB_3 .

Раздел 3. Электрические и магнитные свойства молекулярных систем и их использование для изучения строения молекул. (4 час.).

Тема 1. Магнитный момент. Магнитная восприимчивость. (1час).

Магнитный момент и методы его определения. Связь магнитного момента и магнитной восприимчивости.

Тема 2. Использование магнитных свойств при изучении строения молекул. (2 час).

Применение магнитных свойств для определения термов атомов и молекул, в методе МО. Сущность методов ЭПР и ЯМР.

Тема 3. Дипольный момент (1 час.).

Дипольный момент в классической и квантовой механике. Индуцированный дипольный момент. Методы определения и вычисления дипольного момента.

Тема 4. Поляризуемость молекул (2 час.), в том числе с использованием MAO-лекция – беседа (2 часа).

Поляризуемость молекул. Эллипсоид поляризуемости. Уравнение Ланжевена-Дебая. Поляризационная теория. Зависимость поляризуемости и поляризующего действия от электронной конфигурации, размера и заряда иона. Молярная рефракция. Закономерности в величинах молярной рефракции.

Раздел 4. Внутримолекулярное движение и электромагнитные спектры. (8 час.).

Тема 1. Вращательное движение (1 час.)

Приближение жесткого ротатора. Момент инерции. Энергия вращения. Вращательная постоянная.

Тема 2. Вращательные спектры (2час.), в том числе с использованием МАО-лекция с разбором конкретных ситуаций (2 часа).

Вращательные спектры. Правила отбора. Определение молекулярных параметров из вращательных спектров.

Тема 3. Колебательное движение и колебательный спектр. (2 час.)

Нормальные колебания: число, тип, симметрия. Колебательно-вращательный спектр. Приближение гармонического осциллятора. Правила отбора и спектр гармонического осциллятора.

Тема 4. Молекула - ангармонический осциллятор (2 час.), в том числе с использованием МАО-лекция с разбором конкретных ситуаций (2 часа).

Потенциал Морзе. Правила отбора и спектр ангармонического осциллятора. Определение геометрических параметров и другой информации из спектров.

Тема 5. Колебательные спектры комбинационного рассеяния. Колебательные спектры многоатомных молекул. (1 час).

Понятие о КР – спектрах и их использовании при изучении строения молекул. Особенности ИК - и КР -спектров многоатомных молекул.

Раздел 5. Комплексные соединения. Межмолекулярные взаимодействия. Строение конденсированных фаз. (6 час.).

Тема 1. Комплексные соединения (2 час.), в том числе с использованием МАО-лекция с разбором конкретных ситуаций (2 часа).

Комплексы π -акцепторного типа. Применение методов МО и ВС для описания строения комплексных соединений.

Тема 2. Межмолекулярные взаимодействия(2час).

Межмолекулярные взаимодействия: индукционное, ориентационное, дисперсионное взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовы молекулы. Взаимосвязь сил Ван-дер-Ваальса

Тема 3. Агрегатное состояние вещества (2 час.).

Строение конденсированных фаз. Жидкости, аморфные вещества, мезофазы, кристаллы, их поверхности и границы раздела.

Кристаллическое состояние вещества: Элементарные кристаллы; Кристаллы с ковалентной связью; Ионные кристаллы. Аморфное, жидкое и газообразное состояние вещества. Интерметаллиды. Стекла.

II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Модуль1 (36 час.)

Занятия №№1-2. Тема: Алгебра операторов. Операторы основных физических величин (4 часа).

План занятий

I.Разбор теоретических вопросов:

Тема: Алгебра операторов:

1. Дать определение операторам.
2. Как обозначаются операторы?
3. Когда оператор считается заданным?
4. Что означает сумма или разность операторов?
5. Что означают понятия коммутативные и некоммутативные операторы?
6. Произведение 2-х одинаковых операторов?
7. Что представляют собой линейные самосопряженные (эрмитовы) операторы?
- 8.Что означает понятие комплексное сопряжение ?

II.Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Проверить линейность операторов.
2. Найти явный вид оператора.
3. Доказать, что $F + G = G + F$

Тема: Операторы основных физических величин

I.Разбор теоретических вопросов:

1. Оператор координаты x .
2. Оператор момента импульса.
3. Оператор кинетической энергии:
4. Выражения для составляющих оператора момента импульса в сферических координатах.

5. Выражение ∇^2 в сферических координатах.

6. Оператор полной энергии частицы или системы.

7. Операторы кинетической и потенциальной энергии.

II.Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Доказать, что оператор физической величины является эрмитовым (самосопряженным).
2. Найти эрмитово-сопряженный оператор для оператора дифференцирования $\mathbf{D} = d/dx$.

3. Проверить эрмитовость оператора \hat{p}_y .

Занятия №№ 3-4. Тема: Коммутационные соотношения (4 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

1. В каком случае величины L и M могут быть одновременно и точно измерены?

2. Что показывают соотношения:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

3. Приведите соотношение неопределенности для энергии и времени.

4. Напишите соотношения для коммутативных операторов.

5. Что показывают соотношения:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

6. Напишите соотношения для коммутативных операторов.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Показать, что операторы проекций импульса коммутируют между собой.

2. Показать, что оператор координаты и оператор проекции импульса на другую координату коммутируют.

3. Вычислить коммутатор $[\hat{L}_x, \hat{y}], [\hat{L}_y, \hat{z}], [\hat{p}_x, \hat{L}_z]$

4. Доказать, что, если два эрмитовых оператора \mathbf{F} и \mathbf{G} коммутируют, то их произведение также является эрмитовым.

Занятия №№ 5-6 Тема: Задачи на собственные функции и собственные значения (4 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

1. В каком случае говорят, что a – это собственное значение оператора

$\hat{L} = \frac{d}{dx}$, а функция $f = e^{ax}$ - собственная функция оператора $\hat{L} = \frac{d}{dx}$?

2. Как записать условие, при котором оператор \hat{L} оставляет функцию f неизменной, с точностью до постоянного множителя?

3. Что называется спектром собственных значений оператора \hat{L} ? Каким он может быть? 4. В каком случае говорят, что этот спектр n -кратно вырожден?

5. Какие собственные функции f_n и f_m самосопряженного оператора \hat{L} ортогональны между собой?

6. Что понимается под нормированием функции f_n ? а коэффициент $\frac{1}{A}$ - коэффициентом

7. Как записать условие ортогональности и нормировки вместе?

8. Разбор теорем:

Теорема. Если несколько собственных функций принадлежат одинаковым собственным значениям, то любая линейная комбинация из этих функций является решением того же операторного уравнения и с тем же собственным значением.

Теорема. Если 2 оператора \hat{L} и \hat{M} имеют общую полную систему собственных функций, они коммутируют.

Теорема. Если 2 оператора \hat{L} и \hat{M} коммутируют, то они имеют общие собственные функции.

Теорема. Система собственных функций операторного уравнения полна. Это значит, что любую функцию $F(x)$, определенную в той же области переменных и подчиненную тем же граничным условиям, что и собственные функции дискретного спектра $f_n(x)$ оператора \hat{L} , можно представить в виде ряда из этих собственных функций:

$$F(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + \dots + c_n f_n(x)$$

$$F(x) = \sum_n c_n f_n(x)$$

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Доказать, что собственные значения эрмитова оператора являются вещественными числами.

2. Показать, что функции ϕ и $\varphi = \phi e^{i\delta}$ описывают одно и то же физическое состояние.

3. Найти собственные значения и собственные функции оператора проекции момента импульса на ось z .

4. Найти собственные значения и собственные функции оператора проекции импульса p_x .

5. Найти собственные функции оператора координаты.

Занятия №№ 7-8. Тема: Среднее значение физической величины. Одномерные задачи квантовой механики, частица в потенциальной яме, в потенциальном ящике (4 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

Тема: Среднее значение физической величины

1. Что является единственно возможным значением физической величины?

2. Назовите основное уравнение квантовой механики. Кем и когда оно предложено?

3. Что такое волновая функция?

4. Приведите стационарное уравнение. Шредингера. Почему оно так называется?

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Показать, что необходимым и достаточным условием вещественности среднего значения величины F является эрмитовость (самосопряженность) ее оператора F .

2. Найти связь между средними значениями координаты и импульса двух частиц, волновые функции которых Ψ_1 и Ψ_2 связаны соотношением $\Psi_2(x) = \Psi_1(x + a)$, $a = \text{const}$.

3. Доказать, что если в одном и том же состоянии среднее значение величины A равно $\langle A \rangle$, а среднее значение величины B равно $\langle B \rangle$, то среднее значение суммы $\langle A + B \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle$.

Тема: Одномерные задачи квантовой механики, частица в потенциальной яме, в потенциальном ящике

1. Постановка задачи:

Пусть частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l . Найти:

- Нормированные волновые функции стационарных состояний и энергетический спектр частицы, используя уравнение Шредингера.

- Возможные значения энергии частицы, исходя из того, что реализуются лишь такие ее состояния, при которых в пределах данной ямы укладывается целое число полуволен де Бройля.

- Вероятность пребывания частицы в области $l/3 < x < 2l/3$, если она находится в основном энергетическом состоянии.

- Среднее значение координаты частицы $\langle x \rangle$ и проекции импульса $\langle p_x \rangle$ если частица находится в основном состоянии.

2. Анализ условия.

3. Решение.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Найти вероятность пребывания частицы в области $l/3 < x < 2l/3$, если она находится в основном энергетическом состоянии.

2. Нарисовать волновые функции первых трех состояний для частицы, находящейся в потенциальной яме с потенциалом, изображенным на рисунке. Для каждого состояния указать число узлов функции и число максимумов на кривой плотности вероятности. Написать граничные условия, необходимые для расчета волновой функции.

3. Нарисовать волновые функции первых трех состояний для частицы, находящейся в потенциальной яме с потенциалом, изображенным на рисунке. Для каждого состояния указать число узлов функции и число максимумов на кривой плотности вероятности. Написать граничные условия, необходимые для расчета волновой функции.

Занятия №№ 9-10. Тема: Гармонический осциллятор. Теория момента импульса, движение частицы в центральном поле. Водородоподобный атом (2 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

Тема: Гармонический осциллятор:

1. Решение операторного уравнения для нахождения возможных значений энергии частицы.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Найти наиболее вероятное положение частицы при заданных условиях.

Тема: Теория момента импульса, движение частицы в центральном поле. Водородоподобный атом:

1. Нахождение собственных функций и собственные значения проекции оператора момента импульса и квадрата оператора момента импульса.

2. Квантование орбитального момента и его проекции.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Изобразите радиальную и сферическую поверхностную функции для

состояния электрона в атоме водорода с волновой функцией Ψ_{320} .

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} e^{-\rho/3} \rho^2 \quad S_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{1}{2} (3 \cos^2 \Theta - 1)$$

Нарисуйте и назовите атомную орбиталь.

2. Изобразите радиальную и сферическую поверхностную функции для состояния электрона в атоме водорода с волновой функцией Ψ_{321} .

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} e^{-\rho/3} \rho^2 \quad S_{21} = \sqrt{\frac{5}{12\pi}} 3 \sin \Theta \cos \Theta \cos \varphi$$

Нарисуйте и назовите атомную орбиталь.

Занятия №№ 11-12. Тема: Многоэлектронные атомы. Термы многоэлектронных атомов (4 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Что такое одноэлектронное приближение?
2. Что такое электронная конфигурация? Однократно- или двукратно-возбужденная электронная конфигурация?
3. В чем сущность метода Хартри? Запишите оператор потенциальной энергии i -го электрона в методе Хартри.

4. В чем смысл метода самосогласованного поля? Что понимается под самосогласованным полем?

5. Что такое терм атома?

II. Решение задач

Примеры задач:

1. Определить терм основного состояния атома V (порядковый номер - 23).
2. Определить, для какого атома терм основного состояния $^4S_{3/2}$.
3. Атом Ti (электронная конфигурация: $3d^24s^2$) может иметь следующие термы: 1S , 3P , 1D , 1G , 3F . Расположить термы в порядке возрастания энергии.
4. Определить терм основного состояния атома Br (порядковый номер - 35).
5. Определить, для какого атома терм основного состояния $^2D_{3/2}$.
6. Атом Ni (электронная конфигурация: $3d^84s^2$) может иметь следующие термы: 1S , 3P , 1D , 1G , 3F . Расположить термы в порядке возрастания энергии.

Занятия №№ 13-14. Тема: Метод Хартри-Фока. (4 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Какое основное отличие заложено в метод Хартри-Фока по сравнению с методом Хартри?
2. Что такое остовная энергия молекулы в методе Хартри-Фока?

3. Какие экспериментальные возможности существуют для проверки теоремы Купманса?

4. Разбор примеров и задач.

Занятия №№ 15-16. Номенклатура базисных наборов (4 часа).

План занятий

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Что понимают под электронной корреляцией? Что такое дырка Ферми? Учитывает ли корреляцию метод Хартри-Фока? Какую?

2. Почему методы учета корреляционной энергии иногда называют пост-хартри-фоковскими?

3. Расшифруйте и объясните аббревиатуры MP4, CISD, CCSDT.

4. Назовите обменный и корреляционный функционалы в составе B3LYP.

5. SVWN, PBE, BLYP, B3LYP. Какие из перечисленных функционалов относятся к градиент-корректированным, какие из них являются гибридными?

6. Что означает термин *ab initio*? Какие квантово-химические методы подходят под это определение?

7. Разбор примеров и задач.

Занятия №№ 17-18. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана (4 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. В молекуле (как и в атоме) имеются дискретные энергетические состояния отдельных электронов (молекулярные орбитали) с их самосогласованным движением в поле друг друга и всех ядер молекулы.

2. Каждая орбиталь характеризуется своим набором квантовых чисел, отражающих свойства электронов в данном энергетическом состоянии.

3. Характер распределения электронов по МО определяет порядок (кратность) связи, её энергию, межъядерные расстояния (длина связи), магнитные свойства молекул и др.

4. Заполнение молекулярных орбиталей подчиняется тем же правилам, что и заполнение атомных: принципу энергетической выгодности, принципу Паули, правилу Хунда, принципу заполнения электронных структур Aufbau.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Пусть число базисных орбиталей - n . Оцените число интегралов, которые нужно вычислить для задания матриц уравнения Рутаана.

2. Получите уравнения Рутаана используя вариационный метод.

Модуль 2 (24 час.)

Занятие № 1. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки (2 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Чем обуславливается конфигурация связей многовалентного атома (или иона)?

2. Назовите ориентации облаков \bar{e} -пар валентных орбиталей в пространстве в зависимости от их числа.

3. Как изменяется сила отталкивания \bar{e} -пар (E - неподеленная, X - поделенная) в валентной оболочке в ряду E-E \rightarrow E-X \rightarrow X-X? Вместо " \rightarrow " поставьте знак ">" или "<".

4. Почему с увеличением числа неподеленных \bar{e} -пар уменьшается валентный угол а однотипных молекулах?

5. Почему неподеленная электронная пара занимает а пространстве больший объем?

6. Объясните и помощью основных положений теории ОЭПВО правило полярности, согласно которому в структурах молекул AX₅, AX₄E, AX₃E₂, производных от тригональной бипирамиды, более электроотрицательные лиганды всегда занимают аксиальные положения, и аксиальные связи удлинены по сравнению с экваториальными?

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Определите геометрическое строение молекул: а) PCl₃, SnCl₂, IF₅, ClF₃, [ICl₂]⁻, [ICl₄]⁻, SCl₄; б) BeCl₂, BCl₃, CH₄, PCl₅, SCl₆, XeF₆; в) COCl₂, SOF₄, TeO₂, HNO₂, H₂SO₄, SO₂F₂, IOF₅; г) SF₃N, CH \equiv CH

Занятия №№ 2-3. Метод МО ЛКАО, гомонуклеарные и гетеронуклеарные двухатомные молекулы (4час).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Классификация молекулярных орбиталей по связывающим свойствам.

2. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии.

3. Классификация молекулярных орбиталей по энергии.

4. Построение волновых функций и энергетических диаграмм гомонуклеарных двухатомных молекул.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Сравнить устойчивость и длину связей в молекулах N₂, N₂⁺ и N₂⁻, используя метод МО.

2. Записать волновые функции МО и построить энергетические диаграммы следующих молекул: CO, CN⁺.

Занятие № 4. Симметрия молекул. Многоатомные молекулы в ММО (2 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Точечные группы симметрии молекул. Операции симметрии.
2. Правило группового умножения.
3. Представления и характеры представлений точечных групп.

Приводимые (ПП) и неприводимые представления (НП).

4. Классификация молекулярных орбиталей многоатомных молекул.

5. Представление о делокализованных и локализованных МО, их использовании для описания одноэлектронных и коллективных свойств

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Составление таблицы НП для группы симметрии C_{2v}.

2. Построение волновых функций МО и энергетических диаграмм для многоатомных молекул (H₂O, NH₃, CH₄).

Занятие № 5. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях (2 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Сформулируйте принцип сохранения орбитальной симметрии.

2. Дайте определение согласованным, перициклическим реакциям.

Приведите примеры.

3. Что такое супраповерхностное и антароповерхностное присоединение? Примеры.

4. В чем заключается метод корреляционных диаграмм?

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Рассмотрите с помощью корреляционных диаграмм реакцию димеризации этилена по типу $\pi_s^2 + \pi_s^2$ и по типу $\pi_s^2 + \pi_a^2$. Какая из них разрешена, а какая запрещена по симметрии?

2. Рассмотрите с помощью корреляционных диаграмм реакцию диенового синтеза (реакция Дильса-Альдера) – присоединение олефинов к диенам. Докажите, что она разрешена по симметрии.

Занятия №№ 6-7. Диаграммы Уолша. Метод Хюккеля. Применение к диеновым и ароматическим соединениям (4 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Подход Уолша к оценке расположения МО на энергетической шкале в однотипных соединениях. Положительное и отрицательное перекрытия.

2. Построение корреляционных диаграмм для молекул AB_2 линейного и углового строения.

3. Построение корреляционных диаграмм для плоских и пирамидальных молекул AB_3 .

4. Подход Хюккеля к описанию связи в непредельных соединениях.

Основные положения метода Хюккеля.

5. Расчет энергии и волновой функции молекулы аллила.

6. Электронная плотность, заряд на атомах, порядок связи, индекс свободной валентности.

6. Расчет энергии и волновой функции молекулы бензола.

Особенности ароматических соединений. Правило Хюккеля

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Определите с помощью диаграммы Уолша, какие из перечисленных молекул будут угловыми, а какие линейными: BH_2 , CH_2 , H_2O , NH_2^+ ?

2. Рассчитанные по методу МОХ, π -МО бутадиена имеют вид:

$$\Psi_1 = 0.372 x_1 + 0.602 x_2 + 0.602 x_3 + 0.372 x_4$$

$$\Psi_2 = 0.602 x_1 + 0.372 x_2 - 0.372 x_3 - 0.602 x_4$$

$$\Psi_3 = 0.602 x_1 - 0.372 x_2 - 0.372 x_3 + 0.602 x_4$$

$$\Psi_4 = 0.372 x_1 - 0.602 x_2 + 0.602 x_3 - 0.372 x_4 .$$

Учитывая, что электронами заняты только первые две π -МО, рассчитайте электронные плотности на 3-ем и 4-ом атомах углерода и порядок связи между ними.

Занятие №№ 8-9. Магнитные свойства молекул. Электрические свойства молекул (4 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Чем обусловлены магнитные свойства вещества?

2. Какие вещества являются парамагнитными? В чем особенность парамагнетизма?

3. Диамагнетизм. Его особенности.

4. Магнитная восприимчивость и магнитные моменты.

5. Энергия молекулы в магнитном поле. Расщепление вырожденных уровней энергии.

6. Использование магнитных свойств при изучении строения молекул.

7. Спектральные методы, основанные на магнитных свойствах веществ.

Понятие об ЭПР- и ЯМР-методах.

8. Дипольный момент. Физический смысл, методы определения. Вычисление дипольного момента по аддитивной схеме.

9. Дипольный момент и симметрия молекул, полярные и неполярные молекулы.

10. Поляризуемость и ее зависимость от строения молекул; Эллипсоид поляризуемости;

11. Вычисление поляризуемости по аддитивной схеме;

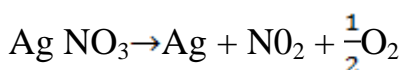
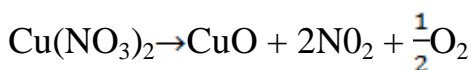
12. Поляризационная теория;

13. Применение поляризационной теории для объяснения реакционной способности молекул.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Объяснить с точки зрения поляризационной теории почему получается различные продукты при термическом разложении нитратов:



2. Рассчитать дипольные моменты изомеров толуоловой кислоты $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{COOH}$, если дипольный момент группы CH_3 в бензольном ядре равен +0.4Д, а дипольный момент группы COOH в бензольном ядре равен -0.9Д.

3. Используя представление о симметрии, определите, какие из перечисленных ниже молекул являются полярными, а какие неполярными: HCN , NOCl , NH_3 , AlF_3 , H_2S , COCl_2 , H_2O , SiH_4 , CF_4 , CO_2 .

Занятия №№ 10 -11 Вращательное движение и вращательные спектры молекул. Колебательное движение и колебательные спектры молекул (4 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов:

1. Внутримолекулярное движение и электромагнитный спектр;

2. Вращательное движение (приближение жесткого ротатора). Вращательная постоянная. Вращательное квантовое число Вращательные уровни энергии.

3. Вращательный спектр поглощения и испускания. Правила отбора.

4. Нормальные колебания и их классификация.

5. Колебательное движение в приближении гармонического осциллятора.

6. Колебательный спектр поглощения и испускания.
7. Молекула- ангармонический осциллятор.
8. КР спектры. Правила отбора.
9. Определение молекулярных параметров из колебательных спектров

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Изучение ИК-вращательного спектра газообразного HF дает для вращательной постоянной значение $B = 41.14 \text{ см}^{-1}$. Рассчитать значение энергии вращения для состояний, отвечающих вращательным квантовым числам 1, 2, 3, 4, 5. Вычислить величину кванта энергии, возбуждающего переход молекулы с данного уровня на соседний.

2. Первая полоса в колебательном спектре поглощения газообразного лежит при $3.46 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, вторая - при $1.76 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, третья - при $1.15 \cdot 10^{-4} \text{ см}$. Найти значение фактора ангармоничности χ и ω_0 - основную частоту колебаний молекулы.

Занятие № 12. Комплексные соединения. Межмолекулярное взаимодействие. Агрегатное состояние вещества (2 часа).

План занятия

I. Разбор теоретических вопросов по координационным соединениям:

1. Классификация карбониллов металлов по функции молекулы CO как структурного фрагмента комплекса.

2. Состав карбониллов. Правило инертного газа.

3. Образование связи в карбонилах металлов по методу ВС.

4. .Образование связи в карбонилах металлов по методу МО.

5. Теория поля лигандов.

II. Решение задач

Примеры типов задач для решения:

1. Рассмотреть строение $[\text{Cr}(\text{CO})_6]$, используя метод МО.

III. Разбор теоретических вопросов по межмолекулярному взаимодействию и агрегатному состоянию вещества:

1. Ориентационное взаимодействие;

2. Индукционное взаимодействие;

3. Дисперсионное взаимодействие;

4. Взаимосвязь сил Ван- дер- Вальса; Ван- дер- Вальсовы молекулы; Ион-молекулярное взаимодействие.

5. Дать характеристику кристаллического состояния вещества: элементарные кристаллы; кристаллы с ковалентной связью; ионные кристаллы.

6. Природа водородной связи.

7.Аморфное, жидкое и газообразное состояние вещества.

8.Интерметаллиды.Состав.Строение.

9.Стекла. Состав.Строение.

Большая часть учебного материала должна быть проработана студентом самостоятельно, внеаудиторных занятий. Самостоятельная работа студентов является неотъемлемой составной частью процесса подготовки специалистов.

Под самостоятельной работой студента понимается часть учебной планируемой работы, которая выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, без его непосредственного участия. Самостоятельная работа направлена на усвоение системы научных и профессиональных знаний, формирование умений и навыков, приобретение опыта самостоятельной творческой деятельности.

Самостоятельная работа студентов включает в себя подготовку к практическим работам, описание проделанной работы с приведением расчетов, графиков, таблиц и выводов, подготовка к защите теории по работе, самоконтроль знаний по теме работы с помощью вопросов к каждой работе, подготовка к коллоквиумам. Для качественного выполнения практических работ каждый студент должен заранее подготовиться к очередной работе. Подготовка складывается из изучения цели, задач и содержания практической работы, повторения теоретического материала, относящегося к работе.

Требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы

Подготовка к практическим работам оценивается в ходе устного опроса по пятибалльной системе.

Отчеты по практическим работам составляются студентами индивидуально и защищаются устно, оцениваются по пятибалльной системе.

Отчеты по практическим работам представляются в электронной форме, подготовленные как текстовые документы в редакторе MSWord.

Отчет по работе должен быть обобщающим документом, включать всю информацию по выполнению заданий, в том числе, уравнения реакций, таблицы, методику проведения лабораторных опытов, список литературы, расчеты и т. д.

Структурно отчет по практической работе, как текстовый документ, комплектуется по следующей схеме:

Титульный лист – обязательная компонента отчета, первая страница отчета, по принятой для лабораторных работ форме (титульный лист отчета должен размещаться в общем файле, где представлен текст отчета).

Исходные данные к выполнению заданий – обязательная компонента отчета, с новой страницы, содержат указание варианта, темы и т.д.).

Основная часть – материалы выполнения заданий, разбивается по рубрикам, соответствующих заданиям работы, с иерархической структурой: пункты – подпункты и т. д.

Рекомендуется в основной части отчета заголовки рубрик (подрубрик) давать исходя из формулировок заданий, в форме отглагольных существительных.

Выводы – обязательная компонента отчета, содержит обобщающие выводы по работе (какие задачи решены, оценка результатов, что освоено при выполнении работы).

Список литературы – обязательная компонента отчета, с новой страницы, содержит список источников, использованных при выполнении работы, включая электронные источники (список нумерованный, в соответствии с правилами описания библиографии).

План-конспект занятия и отчет по практической работе относится к категории «письменная работа», оформляется по правилам оформления письменных работ студентами ДВФУ.

Необходимо обратить внимание на следующие аспекты в оформлении отчетов работ:

- набор текста;
- структурирование работы;
- оформление заголовков всех видов (рубрик-подрубрик-пунктов-подпунктов, рисунков, таблиц, приложений);
- оформление перечислений (списков с нумерацией или маркировкой);
- оформление таблиц;
- оформление иллюстраций (графики, рисунки, фотографии, схемы);
- набор и оформление математических выражений (формул);
- оформление списков литературы (библиографических описаний) и ссылок на источники, цитирования.

Набор текста осуществляется на компьютере, в соответствии со следующими требованиями:

- печать – на одной стороне листа белой бумаги формата А4 (размер 210 на 297 мм.);
- интервал межстрочный – полуторный;
- шрифт – Times New Roman;
- размер шрифта - 14 пт., в том числе в заголовках (в таблицах допускается 10-12 пт.);
- выравнивание текста – «по ширине»;

– поля страницы - левое – 25-30 мм., правое – 10 мм., верхнее и нижнее – 20 мм.;

– нумерация страниц – в правом нижнем углу страницы (для страниц с книжной ориентацией), сквозная, от титульного листа до последней страницы, арабскими цифрами (первой страницей считается титульный лист, на котором номер не ставится, на следующей странице проставляется цифра «2» и т. д.).

– режим автоматического переноса слов, за исключением титульного листа и заголовков всех уровней (перенос слов для отдельного абзаца блокируется средствами MSWord с помощью команды «Формат» – абзац при выборе опции «запретить автоматический перенос слов»).

Если рисунок или таблица размещены на листе формата больше А4, их следует учитывать как одну страницу. Номер страницы в этих случаях допускается не проставлять.

Список литературы и все приложения включаются в общую в сквозную нумерацию страниц работы.

III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Критерии оценки самостоятельной работы

По теме для самостоятельного изучения студенты опрашиваются устно на консультациях согласно графику, оцениваются по пятибалльной системе.

Оценка «Отлично»

А) Задание выполнено полностью.

Б) Отчет/ответ составлен грамотно.

В) Ответы на вопросы полные и грамотные.

Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Хорошо»

А), Б) - те же, что и при оценке «Отлично».

В) Неточности в ответах на вопросы, которые исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Удовлетворительно»

А), Б) - те же, что и при оценке «Отлично».

В) Неточности в ответах на вопросы, которые не всегда исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан, но усвоен не достаточно полно.

Оценка «Неудовлетворительно»

А) Программа не выполнена полностью.

Б) Устный отчет и ответы на вопросы не полные и не грамотные.

В) Материал не понят, не осознан и не усвоен.

Методические рекомендации для подготовки к коллоквиуму

Коллоквиум является одной из составляющих учебной деятельности студента по овладению знаниями. Целью коллоквиума является определение качества усвоения лекционного материала и части дисциплины, предназначенной для самостоятельного изучения.

Задачи, стоящие перед студентом при подготовке и написании коллоквиума:

1. закрепление полученных ранее теоретических знаний;
2. выработка навыков самостоятельной работы;
3. выяснение подготовленности студента к будущей практической работе.

Коллоквиум проводится под наблюдением преподавателя. Тема коллоквиума известна и проводится она по сравнительно недавно изученному материалу, в соответствии с перечнем тем и вопросов для подготовки.

Преподаватель готовит задания либо по вариантам, либо индивидуально для каждого студента. По содержанию работа может включать теоретический материал, задачи, тесты, расчеты и т.п. выполнению работы предшествует инструктаж преподавателя.

Ключевым требованием при подготовке к коллоквиуму выступает творческий подход, умение обрабатывать и анализировать информацию, делать самостоятельные выводы, обосновывать целесообразность и эффективность предлагаемых рекомендаций и решений проблем, чётко и логично излагать свои мысли. Подготовку к коллоквиуму следует начинать с повторения соответствующего раздела учебника, учебных пособий по данной теме и конспектов лекций.

Самостоятельная работа студентов по изучению отдельных тем дисциплины включает поиск учебных пособий по данному материалу, проработку и анализ теоретического материала, самоконтроль знаний по данной теме с помощью контрольных вопросов и заданий.

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

№ п/п	Дата/сроки выполнения	Вид самостоятельной работы	Примерные нормы времени на выполнение	Форма контроля
Модуль 1.				
1.	1.02.22-15.03.22	Подготовка к практическим занятиям,	6 час	Контрольная работа №1

		контрольным работам.		
2.	16.03.22-30.04.22	Подготовка к практическим занятиям, контрольным работам.	6 час	Контрольная работа №2
3.	1.05.22-30.05.22	Подготовка к практическим занятиям, контрольным работам.	6 час	Контрольная работа №3
	Промежуточная аттестация	Подготовка к экзамену	36 час	Экзамен
Модуль 2				
1.	1.09.22-15.10. 22	Подготовка к практическим занятиям, сдаче коллоквиума.	4 час	Принятие коллоквиумов №№ 1-2 с оценкой в соответствии с рейтинг-планом. Контрольные работы №№1-2.
2	16.10.22-30.11.22	Подготовка к практическим занятиям, сдаче коллоквиума.	5 час	Принятие коллоквиума №3 с оценкой в соответствии с рейтинг-планом. Контрольные работы №№ 3--4.
3.	1.12.22-30.12.22	Подготовка к практическим занятиям, сдаче коллоквиума.	5 час	Принятие коллоквиума №4с оценкой в соответствии с рейтинг-планом Контрольная работа №5.
4.	Промежуточная аттестация	Подготовка к экзамену	36	Экзаменационные билеты

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

В соответствии с целями и задачами дисциплины студент изучает на занятиях и дома разделы лекционного курса, готовится к практическим занятиям, проходит контрольные точки текущей аттестации, включающие разные формы проверки усвоения материала (опрос, тестирование и др.).

Самостоятельная работа включает подготовку к практическим занятиям (работа с литературой, проработка тем лекционных занятий), к тестированию и контрольным работам.

Самостоятельная работа может осуществляться индивидуально или группами студентов в зависимости от цели, объема, конкретной тематики самостоятельной работы, уровня сложности, уровня умений студентов.

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям

Самостоятельная работа студентов по подготовке к практическим занятиям включает в себя проработку тематического плана лекций, уделяя особое внимание структуре и содержанию темы и основных понятий. Изучение «сложных» тем следует начинать с составления логической схемы основных понятий, категорий, связей между ними. Целесообразно прибегнуть к классификации материала, в частности при изучении тем, в которых присутствует большое количество незнакомых понятий, категорий, теорий, концепций, либо насыщенных информацией типологического характера.

В ходе подготовки к практическим занятиям необходимо изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях. При этом учесть рекомендации преподавателя. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем. Целесообразно составить план-конспект своего выступления по вопросам практического занятия.

Виды плана по форме выражения:

1. Номинативный. Это самый краткий способ выражения плана: утвердительные односоставные предложения, главный член которых – в форме подлежащего, например: конформеры.
2. Вопросительный, или вопросный (каждый пункт плана представляет собой вопросительное предложение).
3. Цитатный (пункты плана – цитаты из исходного текста, которые отражают содержание будущего ответа).
4. Тезисный (пункты плана передают основные моменты содержания ответа, который потом легко воспроизвести).

Требования к содержанию плана:

1. план должен соответствовать теме, адекватно и достаточно полно отражать содержание ответа;
2. пункты плана должны быть связаны внутренней логикой (второй пункт вытекает из первого, третий из второго и т.д.);
3. части плана должны быть соразмерены.

Технология составления плана:

1. Прочитайте рекомендованную преподавателем литературу, определяя микротемы, которые раскрывают вопрос.
2. Разделите прочитанное на части.
3. Определите, с какой целью составляется план, и на основе этого решите, какой будет вид плана по форме выражения.
4. Дайте краткое наименование каждой части.
5. Проверьте получившийся план, скорректируйте его, учитывая требования.
6. Определите, достаточно ли адекватно передает структуру и содержание ответа составленный план.
7. В случае необходимости дополните или сократите план.

Требования к оформлению плана:

Пункты плана ответа должны быть единообразно оформлены, иметь единое основание деления.

Студенту рекомендуется следующая схема подготовки к практическому занятию:

1. Проработать конспект лекций;
2. Прочитать основную и дополнительную литературу, рекомендованную по изучаемому разделу;
3. Ответить на вопросы плана практического занятия;
4. Составить план-конспект своего выступления по вопросам практического занятия;
5. При затруднениях сформулировать вопросы к преподавателю.

Критерии оценивания плана-конспекта:

Параметр	Баллы
<ul style="list-style-type: none">• соответствие теме,• адекватно и достаточно полно отражено содержание ответа,• пункты плана связаны внутренней логикой,• части плана соразмерены,• единообразное оформление,• единое основание деления.	100 – 86 (отлично)
<ul style="list-style-type: none">• соответствие теме,	

<ul style="list-style-type: none"> • не достаточно полно отражено содержание ответа, • пункты плана связаны внутренней логикой, • части плана не соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	85 – 76 (хорошо)
<ul style="list-style-type: none"> • соответствие теме, • не достаточно полно отражено содержание ответа, • пункты плана не связаны внутренней логикой, • части плана не соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	75 – 61 (удовлетво- рительно)
<ul style="list-style-type: none"> • не соответствует теме, • не отражено содержание ответа, • пункты плана не связаны внутренней логикой, • части плана не соразмерены, • единообразное оформление, • единое основание деления. 	60-50 (неудовлетво- рительно)

Самостоятельная работа с литературой

Изучая материал по учебной книге (учебнику, учебному пособию, монографии, хрестоматии и др.), следует переходить к следующему вопросу только после полного уяснения предыдущего, фиксируя выводы, в том числе те, которые в учебнике опущены или на лекции даны для самостоятельного вывода. Особое внимание следует обратить на определение основных понятий курса. Надо подробно разбирать примеры, которые поясняют определения, и приводить аналогичные примеры самостоятельно. Полезно составлять опорные конспекты. При изучении материала по учебной книге полезно либо в тетради на специально отведенных полях, либо в документе, созданном на ноутбуке, планшете и др. информационном устройстве, дополнять конспект лекций. Там же следует отмечать вопросы, которые есть необходимость разобрать на консультации с преподавателем. Выводы, полученные в результате изучения учебной литературы, рекомендуется в конспекте выделять, чтобы при перечитывании материала они лучше запоминались.

Подготовка к коллоквиуму

При подготовке к сдаче коллоквиума рекомендуется пользоваться материалами лекций и рекомендованной литературой. Коллоквиум является одной из составляющих учебной деятельности студента по овладению знаниями. Целью коллоквиума является определение качества усвоения лекционного материала и части дисциплины, предназначенной для самостоятельного изучения.

Задачи, стоящие перед студентом при подготовке и написании

коллоквиума:

1. закрепление полученных ранее теоретических знаний;
2. выработка навыков самостоятельной работы;
3. выяснение подготовленности студента к будущей практической работе.

Коллоквиум проводится под наблюдением преподавателя. Тема коллоквиума известна и проводится она по сравнительно недавно изученному материалу, в соответствии с перечнем тем и вопросов для подготовки.

Преподаватель готовит задания либо по вариантам, либо индивидуально для каждого студента. По содержанию работа может включать теоретический материал, задачи, тесты, расчеты и т.п. выполнению работы предшествует инструктаж преподавателя.

Ключевым требованием при подготовке к коллоквиуму выступает творческий подход, умение обрабатывать и анализировать информацию, делать самостоятельные выводы, обосновывать целесообразность и эффективность предлагаемых рекомендаций и решений проблем, чётко и логично излагать свои мысли. Подготовку к коллоквиуму следует начинать с повторения соответствующего раздела учебника, учебных пособий по данной теме и конспектов лекций.

Подготовка к сдаче экзамена

В процессе подготовки к экзамену, следует ликвидировать имеющиеся пробелы в знаниях, углубить, систематизировать и упорядочить знания. Особое внимание следует уделить организации подготовки к экзамену. Наличие полных собственных конспектов лекций является необходимым условием успешной сдачи экзамена. Если пропущена какая-либо лекция, необходимо ее восстановить, обдумать, устранить возникшие вопросы, чтобы запоминание материала было осознанным. Следует помнить, что при подготовке к экзамену вначале надо просмотреть материал по всем вопросам сдаваемой дисциплины, далее отметить для себя наиболее трудные вопросы и обязательно в них разобраться. В заключение еще раз целесообразно повторить основные положения.

Задания по подготовке к практическим занятиям

Модуль 1

1. Подготовка к практическим занятиям.

Задание на дом к занятию №1

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Алгебра операторов».

Задание на дом к занятию №2

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Операторы физических величин».

Задание на дом к занятию №3

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Коммутационные соотношения».

Задание на дом к занятию №№4-5

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач на собственные значения и собственные функции операторов.

Задание на дом к занятию №6

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач на нахождение среднего значения физической величины.

Задание на дом к занятию №№7-9

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к анализу условия и постановке задачи, а также к нахождению волновой функции частицы в потенциальной яме. Определить граничные условия для потенциальных ям различной формы.

Задание на дом к занятию №10

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению общей задачи нахождения энергии гармонических колебаний частицы.

Задание на дом к занятию №11

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теории момента импульса.

Задание на дом к занятию №№12-13

Просмотреть материал лекций, учебники по теории строения многоэлектронного атома и подготовиться к решению задач по нахождению терма основного состояния атома.

Задание на дом к занятию №№14-18

Просмотреть материал лекций, учебники по теории МО ЛКАО и методу Хартри-Фока-Рутаана. Подготовиться к решению задач по нахождению волновых функций простейших молекулярных систем, построению определителя Слэтера, решению уравнений Рутаана.

Модуль 2

1. Подготовка к сдаче коллоквиумов.

При подготовке к сдаче коллоквиумов воспользуйтесь материалами лекций и рекомендованной литературой.

2. Подготовка к практическим занятиям.

Задание на дом к занятию № 1

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие к

практическим занятиям и подготовиться к решению задач по определению пространственного строения молекул по методу Гиллеспи, контрольной работе №1.

Задание на дом к занятиям №№ 2-3

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к написанию волновых функций молекулярных орбиталей двухатомных гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул, построению энергетических диаграмм молекул.

Задание на дом к занятию № 4

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению многоатомных молекул по методу МО с использованием понятия об их симметрии, контрольной работе №2.

Задание на дом к занятию № 5

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению принципа сохранения орбитальной симметрии при химических реакциях.

Задание на дом к занятиям №№ 6-7

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к построению и анализу диаграмм Уолша.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению строения молекул ненасыщенных органических соединений по методу Хюккеля, контрольной работе №3.

Задание на дом к занятиям №№ 8-9

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению магнитных свойств и их использованию для объяснения строения молекул.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению электрических свойств (дипольного момента, поляризуемости) и их использованию для объяснения строения молекул, контрольной работе №4.

Задание на дом к занятиям №№ 10-11

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению вращательного движения и вращательных спектров и их использованию для объяснения строения молекул.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению колебательного движения и колебательных спектров и их использованию для объяснения строения молекул, контрольной работе №5.

Задание на дом к занятию № 12

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению строения комплексных соединений.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению межмолекулярного взаимодействия, агрегатного состояния вещества.

Методические рекомендации по решению задач

При решении задач, заданных на дом и при решении задач, включенных в контрольную работу, целесообразно придерживаться следующего алгоритма:

1. Грамотно провести анализ условия задачи и выявить к какой теме относится задача, решается ли она:

- по химической формуле вещества;
- по математической формуле.

2. Обратит внимание на вопрос задачи, установить, в каких единицах должен быть получен ответ.

3. Записать кратко данные (условие) задачи.

4. Продумать логическую последовательность решения.

5. Выполнить решение, применяя необходимые формулы.

6. Осуществить вычисления.

7. Проверить решение.

Домашние задания для подготовки к контрольным работам

1. Контрольная работа по теории ОЭПВО

1. Объясните и помощью основных положений теории ОЭПВО правило полярности, согласно которому в структурах молекул AX_5 , AX_4E , AX_3E_2 , производных от тригональной бипирамиды, более электроотрицательные лиганды всегда занимают аксиальные положения, и аксиальные связи удлинены по сравнению с экваториальными?

2. Определите геометрическое строение молекул: а) PCl_3 , $SnCl_2$, IF_5 , ClF_3 , $[ICl_2]^-$, $[ICl_4]^-$, SCl_4 ; б) $BeCl_2$, BCl_3 , CH_4 , PCl_5 , SCl_6 , XeF_6 ; в) $COCl_2$, SOF_4 , TeO_2 , HNO_2 , H_2SO_4 , SO_2F_2 , IOF_5 ; г) SF_3N , $CH \equiv CH$

3. Сравните углы XAX в молекулах PF_5 и ClF_3 . В какой из этих молекул он больше и почему?

4. Даны молекулы PI_3 , PBr_3 , PCl_3 , PF_3 . Определите, какое из указанных ниже значений валентного угла относится к каждой из этих молекул: 102° ; $101,5^\circ$; $97,8^\circ$; $100,3^\circ$?

5. Сопоставьте значения валентных углов SPC , CPF (экваториальная плоскость), FPF в молекуле $(CH_3)_2PF_3$.

6. Сравните углы ХАХ в молекулах PCl_3 и CCl_4 . В какой молекуле он больше?

7. Угол НСН в молекуле $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ равен 116.8° , а угол НСС - 122° . Объясните данный факт.

8. Валентные углы в молекуле Cl_2CO имеют значение 111.3° и 124.3° . Определите, какое из этих значений относится к углу ClCCl и какое к углу OCCl .

9. Расположите в порядке возрастания валентного угла ХРХ молекулы POF_3 , POCl_3 , POBr_3 .

10. Угол ONO в ионах $[\text{NO}_2]^+$ и $[\text{NO}_2]^-$ соответственно 180° и 115° . Объясните данный факт.

11. В какой молекуле валентный угол больше: в H_2O или OF_2 ?

2. Контрольная работа по теме: «Метод МО»

1. Записать волновые функции МО и построить энергетические диаграммы следующих молекул: CO , CN^-

2. Сравнить устойчивость и длину связей в молекулах N_2 , N_2^+ и N_2^- , используя метод МО.

3. Записать волновые функции МО и построить энергетические диаграммы следующих молекул: H_2O , NH_3 , CH_4 .

3. Контрольная работа по теме: «Электрические и магнитные свойства»

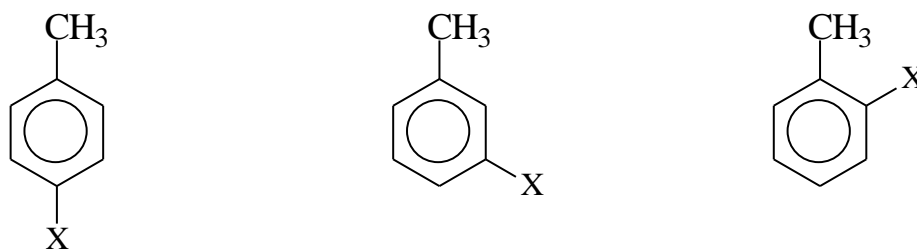
1. Дипольный момент связи $\text{O}-\text{H}$ в воде равен 1.58Д . Определить величину валентного угла в молекуле H_2O , если ее дипольный момент равен 1.84 .

2. Рассчитать дипольный момент молекулы H_2S , если дипольный момент связи $\text{S}-\text{H}$ равен 0.68Д , а валентный угол равен 82° .

3. Дипольный момент молекулы Cl_2O равен 0.78Д . Рассчитать дипольный момент связи, если валентный угол в молекуле Cl_2O равен 115° .

4. Дипольные моменты бромбензола $\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$ и толуола $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ соответственно равны 1.52Д и 0.4Д . При измерении дипольных моментов изомеров бромтолуола получены значения $\mu = 1.44\text{Д}$ и $\mu = 1.75\text{Д}$. Какие изомеры были исследованы?

5. Рассчитать дипольные моменты двузамещенных производных бензола типа:



где $x = \text{Br}, \text{CN}, \text{NO}_2, \text{NH}_2, \text{OH}$, если дипольный момент $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ равен 0.4, а дипольные моменты замещающих групп соответственно равны:

	Br	NO_2	CN	NH_2	OH
$\mu(\text{Д})$	-1.52	-3.96	-3.92	+1.53	-

1.56.

6. Используя представление о симметрии, определите, какие из перечисленных ниже молекул являются полярными, а какие неполярными: $\text{HCN}, \text{NOCl}, \text{NH}_3, \text{AlF}_3, \text{H}_2\text{S}, \text{COCl}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{SiH}_4, \text{CF}_4, \text{CO}_2$.

7. Объясните, почему транс-изомер дихлорэтилена неполярен, а цис-изомер – полярен.

8. Рассчитайте поляризуемость следующих молекул: 2,2-диметилбутан; 2,3-диметилпентан; 2,2,3-триметилпентан.

9. Расположите в ряд в порядке возрастания поляризуемости следующие ионы: $\text{Na}^+, \text{Al}^{3+}, \text{Mg}^{2+}, \text{O}^{2-}, \text{F}^-$.

10. Расположите в порядке уменьшения поляризуемости молекулы $\text{HI}, \text{HF}, \text{HBr}, \text{HCl}$.

11. Используя поляризационную теорию, объясните причину термической нестойкости молекул CaCO_3 и CuCO_3 . Какая из них термически более стойкая? Почему?

12. Объясните причину немонотонного изменения термической устойчивости карбонатов щелочных металлов: от Li_2CO_3 до K_2CO_3 она возрастает, а от K_2CO_3 до Cs_2CO_3 – падает. Почему?

13. Используя поляризационную теорию, объясните, почему от мышьяка к висмуту увеличивается устойчивость соединений со степенью окисления "+3" и падает устойчивость соединений атомов этих элементов со степенью окисления "+5".

14. Рассмотрите закономерности изменения устойчивости соединений элементов подгруппы ванадия (V, Nb, Ta) со степенями окисления "+3" и "+5".

4.Контрольная работа по теме: «Вращательное и колебательное движения»

1. Изучение ИК-вращательного спектра газообразного HF дает для вращательной постоянной значение $B = 41.14 \text{ см}^{-1}$. Рассчитать значение

энергии вращения для состояний, отвечающих вращательным квантовым числам 1, 2, 3, 4, 5. Вычислить величину кванта энергии, возбуждающего переход молекулы с данного уровня на соседний.

Решить аналогичную задачу для HCl, если $B = 20.83 \text{ см}^{-1}$.

Решить аналогичную задачу для HBr, если $B = 16.70 \text{ см}^{-1}$.

Решить аналогичную задачу для HI, если $B = 12.84 \text{ см}^{-1}$.

2. Воспользовавшись условием задачи 1, рассчитать момент инерции и межъядерные расстояния в молекуле HF. Приняв, что атомы в молекуле находятся в тесном контакте, сравнить значение диаметра, полученное из спектральных данных, со значением "газокинетического" диаметра $d = 2.34 \cdot 10^{-8} \text{ см}$.

Решить аналогичную задачу для HCl, если $d = 2.56 \text{ \AA}$.

Решить аналогичную задачу для HBr, если $d = 2.84 \text{ \AA}$.

Решить аналогичную задачу для HI, если $d = 3.24 \text{ \AA}$.

3. Первая полоса в колебательном спектре поглощения газообразного лежит при $3.46 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, вторая - при $1.76 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, третья - при $1.15 \cdot 10^{-4} \text{ см}$. Найти значение фактора ангармоничности χ и ω_0 - основную частоту колебаний молекулы.

Решить аналогичную задачу для молекулы CO. Первая полоса - при $4.67 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, вторая - при $2.35 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, третья - при $1.57 \cdot 10^{-4} \text{ см}$.

4. Воспользовавшись решением задачи 3, рассчитать энергию диссоциации молекулы HCl и энергию, отвечающую переходу молекулы HCl из основного состояния с $v = 0$ в состояние с $v = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.

Решить аналогичную задачу для молекулы CO.

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы

Студенты опрашиваются устно на консультациях согласно графику, оцениваются по пятибалльной системе.

Оценка «Отлично»

А) Задание выполнено полностью.

Б) Отчет/ответ составлен грамотно.

В) Ответы на вопросы полные и грамотные.

Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Хорошо»

А), Б) - те же, что и при оценке «Отлично».

В) Неточности в ответах на вопросы, которые исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Удовлетворительно»

А), Б) - те же, что и при оценке «Отлично».

В) Неточности в ответах на вопросы, которые не всегда исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан, но усвоен не достаточно полно.

Оценка «Неудовлетворительно»

А) Программа не выполнена полностью.

Б) Устный отчет и ответы на вопросы не полные и не грамотные.

В) Материал не понят, не осознан и не усвоен.

Критерии оценивания решения задач.

В решении и объяснении нет ошибок. Ход решения рациональный.

Если необходимо, решение произведено несколькими способами.

IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства - наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
	<p>Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики. Раздел 1. Основные постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Тема 1. Волновая функция, состояние</p> <p>Тема 2. Формализм квантовой механики, операторы. Тема 3. Уравнение Шредингера. Тема 4. Методы решения квантово-механических задач.</p> <p>Тема 5. Простейшие задачи квантовой механики. Тема 6. Волновая функция атома водорода. Раздел 2. Многоэлектронный атом; приближенные методы решения квантово-механических задач. Тема 1. Многоэлектронный атом. Тема 2. Метод Хартри-Фока. Тема 3.</p>	ОПК-3, ОПК - 4	Знает	Сдача коллоквиумов №№1-2 Проверка усвоения материала на занятиях №№1-11, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).	Экзаменационные вопросы №№ 1-19.
			Умеет	Проверка усвоения материала на занятиях №№1-11, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).	
			Владеет	Контрольные работы №№1-3 (ПР-2).	

Электронная корреляция.
Тема 4. Теория функционала плотности.
Раздел 3.
Квантовая химия молекул и теория химической связи.
Тема 1.
Гамильтониан молекулы.
Тема 2. Метод молекулярных орбиталей.
Раздел 4.
Поверхность потенциальной энергии (ППЭ); пути и энергетика химической реакции.
Тема 1.
Поверхность потенциальной энергии.
Тема 2. Колебания молекул.

Модуль 2.
Строение вещества.
Раздел 1. Введение.
Классические и квантово-механические теории строения молекул.
Тема 1.
Теоретические основы учения о строении химических частиц.
Тема 2. Основы современной теории химического строения.
Тема 3. Теория отталкивания

<p>электронных пар валентной оболочки. Тема 4. Приближенные методы решения волнового уравнения. Раздел 2. Геометрия молекул. Энергетическая характеристика молекул. Тема 2. Метод МО Хюккеля. Тема 3. Диаграммы Уолша.</p>				
<p>Модуль 2. Строение вещества. Раздел 2. Геометрия молекул. Энергетическая характеристика молекул. Тема 1.. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях. Раздел 3. Электрические и магнитные свойства молекулярных систем и их использование для изучения строения молекул. Тема 1.Магнитный момент. Магнитная восприимчивость. Тема 2. Использование магнитных свойств при изучении строения молекул. Тема 3.</p>	<p>ОПК-3, ОПК - 4</p>	<p>Знает</p>	<p>Проверка усвоения материала на занятиях №№12-18, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).</p>	<p>Экзаменационные вопросы №№ 20-50.</p>
		<p>Умеет</p>	<p>Сдача коллоквиума №№ 3-4 Проверка усвоения материала на занятиях №№12-18, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).</p>	
		<p>Владеет</p>	<p>Контрольные работы №№4-6 (ПР-2).</p>	

<p>Дипольный момент. Тема 4. Поляризуемость молекул. Раздел 4. Внутримолекулярное движение и электромагнитные спектры. Тема 1. Вращательное движение. Тема 2. Вращательные спектры. Тема 3. Колебательное движение и колебательный спектр. Тема 4. Молекула - ангармонический осциллятор. Тема 5. Колебательные спектры комбинационного рассеяния. Колебательные спектры многоатомных молекул. Раздел 5. Комплексные соединения. Межмолекулярные взаимодействия. Строение конденсированных фаз. Тема 1. Комплексные соединения. Тема 2. Межмолекулярные взаимодействия. Тема 3. Агрегатное состояние вещества.</p>				
--	--	--	--	--

V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела

[Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон.-3-е изд., испр. (эл.). - Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf : 522 с.). -М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - (Учебник для высшей школы).-Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10".

<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623.html>

2.Строение вещества. Строение кристаллов : учеб. пособие / А.М. Голубев, А.А. Волков, И.В. Татьяна, В.Н. Горячева. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. -35 с.: ил

http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0064.htmlhttp://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0064.html

3.Калашников, Н.П. Практикум по решению задач по общему курсу физики. Основы квантовой физики. Строение вещества. Атомная и ядерная физика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.П. Калашников, Н.М. Кожевников, Т.В. Котырло [и др.]. — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2014. — 238 с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=49468

4. Капустина, А.А. Строение вещества с основами квантовой химии (модуль "Строение вещества"): учебно-методическое пособие к семинарским занятиям / А. А. Капустина; Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук. Владивосток : Изд-во Дальневосточного федерального университета, 2017.- 75 с.

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:830024&theme=FEFU>

5. Капустина, А.А. Строение вещества: краткий курс лекций [Электронный ресурс] / А. А. Капустина, Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук. Владивосток: [Изд-во Дальневосточного федерального университета](#), 2015, 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). <http://elib.dvfu.ru/vital/access/manager/Repository/fefu:2233>

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Третьяков, Ю. Д. Химия твердого тела / Ю. Д. Третьяков, А.В.Кнотько, И.А. Пресняков. – М. : Изд-во Академия, 2006. –302 с.

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:245093&theme=FEFU>

2. Минкин, В. И., Теория строения молекул. / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Минаев. - Ростов-на-Дону : Феникс, 1997. – 560 с.

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:246127&theme=FEFU>

3. Борщевский , А.Я.Строение атомных частиц. Многоэлектронные атомы/А.Я. Борщевский . – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2010. -80с.

<http://www.chem.msu.su/rus/weldept.html>:

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://e.lanbook.com/>

2. <http://www.studentlibrary.ru/>
3. <http://znanium.com/>
4. <http://www.nelbook.ru/>

Перечень информационных технологий и программного обеспечения

Платформа электронного обучения Blackboard ДВФУ.
bb.dvfu.ru/webapps/blackboard/execute/staffinfo/manageStaffInfo?course_id=_4650_1&mode=view&mode=cpview

VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Рекомендации по планированию и организации времени, отведенного на изучение дисциплины

Время, отведённое на самостоятельную работу, должно быть использовано обучающимся планомерно в течение семестра.

Планирование – важнейшая черта человеческой деятельности. Для организации учебной деятельности эффективным вариантом является использование средств, напоминающих о стоящих перед вами задачах, и их последовательности выполнения. В роли таких средств могут быть ИТ-технологии (смартфоны, планшеты, компьютеры и т.п.), имеющие приложения/программы по организации распорядка дня/месяца/года и сигнализирующих о важных событиях, например, о выполнении заданий по дисциплине «Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики».

Регулярность – первое условие поисков более эффективных способов работы. Рекомендуется выбрать день/дни недели для регулярной подготовки по дисциплине «Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики», это позволит морально настроиться на выполнение поставленных задач, подготовиться к ним и выработать правила выполнения для них, например, сначала проработка материала лекций, чтение первоисточников, затем выделение и фиксирование основных идей. Рекомендуемое среднее время два часа на одно занятие.

Описание последовательности действий, обучающихся при изучении дисциплины

В соответствии с целями и задачами дисциплины студент изучает на занятиях и дома разделы лекционного курса, готовится к практическим занятиям, проходит контрольные точки текущей аттестации, включающие разные формы проверки усвоения материала (собеседование, тестирование и др.).

Освоение дисциплины включает несколько составных элементов учебной деятельности:

1. Внимательное чтение рабочей программы учебной дисциплины (помогает целостно увидеть структуру изучаемых вопросов). В ней содержится перечень контрольных испытаний для всех разделов и тем, включая экзамен; указаны сроки сдачи заданий, предусмотренных учебной программой курса дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики».

2. Неотъемлемой составной частью освоения курса является посещение лекций и их конспектирование. Глубокому освоению лекционного материала способствует предварительная подготовка, включающая чтение предыдущей лекции, работу с учебниками.

3. Регулярная подготовка к практическим занятиям и активная работа на них, включающая:

- повторение материала лекции по теме;
- знакомство с планом занятия и списком основной и дополнительной литературы, с рекомендациями по подготовке к занятию;
- изучение научных сведений по данной теме в разных учебных пособиях;
- чтение первоисточников и предлагаемой дополнительной литературы;
- посещение консультаций с целью выяснения возникших сложных вопросов при подготовке к практическим занятиям.

4. Подготовка к экзамену (в течение семестра), повторение материала всего курса дисциплины.

Рекомендации по работе с литературой

Изучение дисциплины следует начинать с проработки тематического плана лекций, уделяя особое внимание структуре и содержанию темы и основных понятий. Изучение «сложных» тем следует начинать с составления логической схемы основных понятий, категорий, связей между ними. Целесообразно прибегнуть к классификации материала, в частности при изучении тем, в которых присутствует большое количество незнакомых понятий, категорий, теорий, концепций, либо насыщенных информацией типологического характера.

При работе с литературой обязательно выписывать все выходные данные по каждому источнику. Можно выписывать кратко основные идеи автора и иногда приводить наиболее яркие и показательные цитаты (с указанием страниц). Ищите аргументы «за» или «против» идеи автора.

Чтение научного текста является частью познавательной деятельности. Ее цель – извлечение из текста необходимой информации. От того на сколько

осознанна читающим собственная внутренняя установка (найти нужные сведения, усвоить информацию полностью или частично, критически проанализировать материал и т.п.) во многом зависит эффективность осуществляемого действия.

Используйте основные установки при чтении научного текста:

1. информационно-поисковая (задача – найти, выделить искомую информацию);

2. усваивающая (усилия читателя направлены на то, чтобы как можно полнее осознать и запомнить как сами сведения излагаемые автором, так и всю логику его рассуждений);

3. аналитико-критическая (читатель стремится критически осмыслить материал, проанализировав его, определив свое отношение к нему);

4. творческая (создает у читателя готовность в том или ином виде – как отправной пункт для своих рассуждений, как образ для действия по аналогии и т.п. – использовать суждения автора, ход его мыслей, результат наблюдения, разработанную методику, дополнить их, подвергнуть новой проверке).

Для работы с научными текстами применяйте следующие виды чтения:

1. библиографическое – просматривание карточек каталога, рекомендательных списков, сводных списков журналов и статей за год и т.п.;

2. просмотровое – используется для поиска материалов, содержащих нужную информацию, обычно к нему прибегают сразу после работы со списками литературы и каталогами, в результате такого просмотра читатель устанавливает, какие из источников будут использованы в дальнейшей работе;

3. ознакомительное – подразумевает сплошное, достаточно подробное прочтение отобранных статей, глав, отдельных страниц, цель – познакомиться с характером информации, узнать, какие вопросы вынесены автором на рассмотрение, провести сортировку материала;

4. изучающее – предполагает доскональное освоение материала; в ходе такого чтения проявляется доверие читателя к автору, готовность принять изложенную информацию, реализуется установка на предельно полное понимание материала;

5. аналитико-критическое и творческое чтение – два вида чтения близкие между собой тем, что участвуют в решении исследовательских задач. Первый из них предполагает направленный критический анализ, как самой информации, так и способов ее получения и подачи автором; второе – поиск тех суждений, фактов, по которым или в связи с которыми, читатель считает нужным высказать собственные мысли.

Основным для студента является изучающее чтение – именно оно позволяет в работе с учебной литературой накапливать знания в профессиональной области.

При работе с литературой можно использовать основные виды систематизированной записи прочитанного:

1. Аннотирование – предельно краткое связное описание просмотренной или прочитанной книги (статьи), ее содержания, источников, характера и назначения.

2. Планирование – краткая логическая организация текста, раскрывающая содержание и структуру изучаемого материала.

3. Тезирование – лаконичное воспроизведение основных утверждений автора без привлечения фактического материала.

4. Цитирование – дословное выписывание из текста выдержек, извлечений, наиболее существенно отражающих ту или иную мысль автора.

5. Конспектирование – краткое и последовательное изложение содержания прочитанного.

Подготовка к практическим занятиям

При подготовке к практическим занятиям рекомендуется пользоваться материалами лекций, рекомендованной литературой и ресурсами интернет. Вопросы, которые вызывают затруднение при подготовке, должны быть заранее сформулированы и озвучены во время занятий в аудитории для дополнительного разъяснения преподавателем. Ответы, выносимые на обсуждение, должны быть тщательно подготовлены и по ним составлена схема (план), которой студент пользуется на занятии. При ответе надо логически грамотно выражать и обосновывать свою точку зрения, свободно оперировать понятиями и категориями. При самостоятельном решении задач нужно обосновывать каждый этап решения, исходя из теоретических положений курса.

Подготовка к экзамену

В процессе подготовки к экзамену, следует ликвидировать имеющиеся пробелы в знаниях, углубить, систематизировать и упорядочить знания. Особое внимание следует уделить организации подготовки к экзаменам. Для этого важны следующие моменты - соблюдение режима дня: сон не менее 8 часов в сутки; занятия заканчивать не позднее, чем за 2-3 часа до сна; прогулки на свежем воздухе, неустойчивые занятия спортом во время перерывов между занятиями. Наличие полных собственных конспектов лекций является необходимым условием успешной сдачи экзамена. Если пропущена какая-либо лекция, необходимо ее восстановить, обдумать, устранить возникшие вопросы, чтобы запоминание материала было

осознанным. Следует помнить, что при подготовке к экзаменам вначале надо просмотреть материал по всем вопросам сдаваемой дисциплины, далее отметить для себя наиболее трудные вопросы и обязательно в них разобраться. В заключение еще раз целесообразно повторить основные положения.

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям

Модуль1

1.Подготовка к практическим занятиям.

Задание на дом к занятиям №№1-2

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Алгебра операторов».

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Операторы физических величин».

Задание на дом к занятиям №№ 3-4

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Коммутационные соотношения».

Задание на дом к занятиям №№ 5-6

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач на собственные значения и собственные функции операторов.

Задание на дом к занятиям №№ 7-8

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач на нахождение среднего значения физической величины.

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к анализу условия и постановке задачи, а также к нахождению волновой функции частицы в потенциальной яме. Определить граничные условия для потенциальных ям различной формы.

Задание на дом к занятиям №№ 9-10

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению общей задачи нахождения энергии гармонических колебаний частицы.

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теории момента импульса.

Задание на дом к занятиям №№11-12

Просмотреть материал лекций, учебники по теории строения многоэлектронного атома и подготовиться к решению задач по нахождению термина основного состояния атома.

Задание на дом к занятиям №№13-18

Просмотреть материал лекций, учебники по теории МО ЛКАО и методу Хартри-Фока-Рутаана. Подготовиться к решению задач по нахождению

волновых функций простейших молекулярных систем, построению определителя Слэтера, решению уравнений Рутаана.

Модуль 2

1. Подготовка к сдаче коллоквиумов.

При подготовке к сдаче коллоквиумов воспользуйтесь приведенными выше рекомендациями по работе с литературой. Используйте материалы лекций и рекомендованных литературных источников.

2. Подготовка к практическим занятиям.

Задание на дом к занятию № 1

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие к практическим занятиям и подготовиться к решению задач по определению пространственного строения молекул по методу Гиллеспи, контрольной работе №1.

Задание на дом к занятиям №№ 2-3

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к написанию волновых функций молекулярных орбиталей двухатомных гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул, построению энергетических диаграмм молекул.

Задание на дом к занятию № 4

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению многоатомных молекул по методу МО с использованием понятия об их симметрии, контрольной работе №2.

Задание на дом к занятию № 5

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению принципа сохранения орбитальной симметрии при химических реакциях.

Задание на дом к занятиям №№ 6-7

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к построению и анализу диаграмм Уолша.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению строения молекул ненасыщенных органических соединений по методу Хюккеля, контрольной работе №3.

Задание на дом к занятиям № 8-9

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению магнитных свойств и их использованию для объяснения строения молекул.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению электрических свойств (дипольного момента, поляризуемости) и их использованию для объяснения строения молекул,

контрольной работе №4.

Задание на дом к занятиям №№ 10-11

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению вращательного движения и вращательных спектров и их использованию для объяснения строения молекул.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению колебательного движения и колебательных спектров и их использованию для объяснения строения молекул, контрольной работе №5.

Задание на дом к занятию № 12

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению строения комплексных соединений.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению межмолекулярного взаимодействия, агрегатного состояния вещества.

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, представлены в Приложении 2.

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям

Самостоятельная работа студентов по подготовке к практическим занятиям включает в себя проработку тематического плана лекций, уделяя особое внимание структуре и содержанию темы и основных понятий. Изучение «сложных» тем следует начинать с составления логической схемы основных понятий, категорий, связей между ними. Целесообразно прибегнуть к классификации материала, в частности при изучении тем, в которых присутствует большое количество незнакомых понятий, категорий, теорий, концепций, либо насыщенных информацией типологического характера.

В ходе подготовки к практическим занятиям необходимо изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, новыми публикациями в периодических изданиях. При этом учесть рекомендации преподавателя. Дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем. Целесообразно составить план-конспект своего выступления по вопросам практического занятия.

Виды плана по форме выражения:

1. Номинативный. Это самый краткий способ выражения плана: утвердительные односоставные предложения, главный член которых – в форме подлежащего, например: конформеры.

2. Вопросительный, или вопросный (каждый пункт плана представляет собой вопросительное предложение).

3. Цитатный (пункты плана – цитаты из исходного текста, которые отражают содержание будущего ответа).

4. Тезисный (пункты плана передают основные моменты содержания ответа, который потом легко воспроизвести).

Требования к содержанию плана:

1. план должен соответствовать теме, адекватно и достаточно полно отражать содержание ответа;

2. пункты плана должны быть связаны внутренней логикой (второй пункт вытекает из первого, третий из второго и т.д.);

3. части плана должны быть соразмерены.

Технология составления плана:

1. Прочитайте рекомендованную преподавателем литературу, определяя микротемы, которые раскрывают вопрос.

2. Разделите прочитанное на части.

3. Определите, с какой целью составляется план, и на основе этого решите, какой будет вид плана по форме выражения.

4. Дайте краткое наименование каждой части.

5. Проверьте получившийся план, скорректируйте его, учитывая требования.

6. Определите, достаточно ли адекватно передает структуру и содержание ответа составленный план.

7. В случае необходимости дополните или сократите план.

Требования к оформлению плана:

Пункты плана ответа должны быть единообразно оформлены, иметь единое основание деления.

Студенту рекомендуется следующая схема подготовки к практическому занятию:

1. Проработать конспект лекций;

2. Прочитать основную и дополнительную литературу, рекомендованную по изучаемому разделу;

3. Ответить на вопросы плана практического занятия;

4. Составить план-конспект своего выступления по вопросам практического занятия;

5. При затруднениях сформулировать вопросы к преподавателю.

Критерии оценивания плана-конспекта:

Параметр	Баллы
<ul style="list-style-type: none">• соответствие теме,• адекватно и достаточно полно отражено содержание ответа,• пункты плана связаны внутренней логикой,• части плана соразмерены,• единообразное оформление,• единое основание деления.	100 – 86 (отлично)
<ul style="list-style-type: none">• соответствие теме,• не достаточно полно отражено содержание ответа,• пункты плана связаны внутренней логикой,• части плана не соразмерены,• единообразное оформление,• единое основание деления.	85 – 76 (хорошо)
<ul style="list-style-type: none">• соответствие теме,• не достаточно полно отражено содержание ответа,• пункты плана не связаны внутренней логикой,• части плана не соразмерены,• единообразное оформление,• единое основание деления.	75 – 61 (удовлетворительно)
<ul style="list-style-type: none">• не соответствует теме,• не отражено содержание ответа,• пункты плана не связаны внутренней логикой,• части плана не соразмерены,• единообразное оформление,• единое основание деления.	60-50 (неудовлетворительно)

Подготовка к коллоквиуму

При подготовке к сдаче коллоквиума рекомендуется пользоваться материалами лекций и рекомендованной литературой. Коллоквиум является одной из составляющих учебной деятельности студента по овладению знаниями. Целью коллоквиума является определение качества усвоения лекционного материала и части дисциплины, предназначенной для самостоятельного изучения.

Задачи, стоящие перед студентом при подготовке и написании коллоквиума:

1. закрепление полученных ранее теоретических знаний;
2. выработка навыков самостоятельной работы;
3. выяснение подготовленности студента к будущей практической работе.

Коллоквиум проводится под наблюдением преподавателя. Тема коллоквиума известна и проводится она по сравнительно недавно изученному материалу, в соответствии с перечнем тем и вопросов для

подготовки.

Преподаватель готовит задания либо по вариантам, либо индивидуально для каждого студента. По содержанию работа может включать теоретический материал, задачи, тесты, расчеты и т.п. выполнению работы предшествует инструктаж преподавателя.

Ключевым требованием при подготовке к коллоквиуму выступает творческий подход, умение обрабатывать и анализировать информацию, делать самостоятельные выводы, обосновывать целесообразность и эффективность предлагаемых рекомендаций и решений проблем, чётко и логично излагать свои мысли. Подготовку к коллоквиуму следует начинать с повторения соответствующего раздела учебника, учебных пособий по данной теме и конспектов лекций.

Подготовка к сдаче экзамена

В процессе подготовки к экзамену, следует ликвидировать имеющиеся пробелы в знаниях, углубить, систематизировать и упорядочить знания. Особое внимание следует уделить организации подготовки к экзамену. Наличие полных собственных конспектов лекций является необходимым условием успешной сдачи экзамена. Если пропущена какая-либо лекция, необходимо ее восстановить, обдумать, устранить возникшие вопросы, чтобы запоминание материала было осознанным. Следует помнить, что при подготовке к экзамену вначале надо просмотреть материал по всем вопросам сдаваемой дисциплины, далее отметить для себя наиболее трудные вопросы и обязательно в них разобраться. В заключение еще раз целесообразно повторить основные положения.

Задания по подготовке к практическим занятиям

Модуль 1

1. Подготовка к практическим занятиям.

Задание на дом к занятию №1

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Алгебра операторов».

Задание на дом к занятию №2

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Операторы физических величин».

Задание на дом к занятию №3

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теме «Коммутационные соотношения».

Задание на дом к занятию №№4-5

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению

задач на собственные значения и собственные функции операторов.

Задание на дом к занятию №6

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач на нахождение среднего значения физической величины.

Задание на дом к занятию №№7-9

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к анализу условия и постановке задачи, а также к нахождению волновой функции частицы в потенциальной яме. Определить граничные условия для потенциальных ям различной формы.

Задание на дом к занятию №10

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению общей задачи нахождения энергии гармонических колебаний частицы.

Задание на дом к занятию №11

Просмотреть материал лекций, учебники и подготовиться к решению задач по теории момента импульса.

Задание на дом к занятию №№12-13

Просмотреть материал лекций, учебники по теории строения многоэлектронного атома и подготовиться к решению задач по нахождению термина основного состояния атома.

Задание на дом к занятию №№14-18

Просмотреть материал лекций, учебники по теории МО ЛКАО и методу Хартри-Фока-Рутаана. Подготовиться к решению задач по нахождению волновых функций простейших молекулярных систем, построению определителя Слэтера, решению уравнений Рутаана.

Модуль 2

1. Подготовка к сдаче коллоквиумов.

При подготовке к сдаче коллоквиумов воспользуйтесь материалами лекций и рекомендованной литературой.

2. Подготовка к практическим занятиям.

Задание на дом к занятиям №№ 2-3

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к написанию волновых функций молекулярных орбиталей двухатомных гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул, построению энергетических диаграмм молекул.

Задание на дом к занятию № 4

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению многоатомных молекул по методу МО с использованием понятия об их симметрии, контрольной работе №2.

Задание на дом к занятию № 5

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению принципа сохранения орбитальной симметрии при химических реакциях.

Задание на дом к занятиям №№ 6-7

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к построению и анализу диаграмм Уолша.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению строения молекул ненасыщенных органических соединений по методу Хюккеля, контрольной работе №3.

Задание на дом к занятиям № 8-9

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению магнитных свойств и их использованию для объяснения строения молекул.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению электрических свойств (дипольного момента, поляризуемости) и их использованию для объяснения строения молекул, контрольной работе №4.

Задание на дом к занятиям №№ 10-11

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению вращательного движения и вращательных спектров и их использованию для объяснения строения молекул.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению колебательного движения и колебательных спектров и их использованию для объяснения строения молекул, контрольной работе №5.

Задание на дом к занятию № 12

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению строения комплексных соединений.

Просмотреть материал лекций, учебники и методическое пособие, подготовиться к рассмотрению межмолекулярного взаимодействия, агрегатного состояния вещества.

Методические рекомендации по решению задач

При решении задач, заданных на дом и при решении задач, включенных в контрольную работу, целесообразно придерживаться следующего алгоритма:

1. Грамотно провести анализ условия задачи и выявить к какой теме относится задача, решается ли она:

- по химической формуле вещества;
- по математической формуле.

2. Обратить внимание на вопрос задачи, установить, в каких единицах должен быть получен ответ.
3. Записать кратко данные (условие) задачи.
4. Продумать логическую последовательность решения.
5. Выполнить решение, применяя необходимые формулы.
6. Осуществить вычисления.
7. Проверить решение.

Примеры решения задач

1. Примеры использования теории ОЭВРО для определения геометрического строения и объяснения структурных характеристик молекул:

Пример 1. Установите геометрическое строение молекулы SCl_4 .

Решение:

А) Определяем сумму электронов в валентной оболочке атома серы: электронная конфигурация атома серы $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$, на внешнем уровне 6 электронов. Каждый из атомов хлора поставляет в валентную оболочку атома серы по одному электрону. Отсюда:

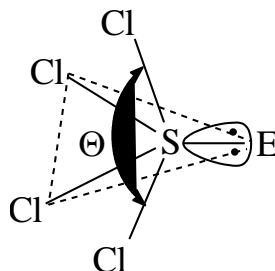
$$\Sigma \bar{e} = 6\bar{e} + 4\bar{e} = 10\bar{e}.$$

Б) Определяем сумму поделенных (n) и неподеленных (m) \bar{e} -пар (она равна суммарному числу электронов, деленному на два):

$$n + m = \frac{10}{2} = 5.$$

В) Определяем расположение \bar{e} -пар в пространстве.

$n+m=5$ - тригональная бипирамида; $n = 4$, $m = 1$ (число n равно числу σ -связей в молекуле). Неподеленная \bar{e} -пара занимает в пространстве больше места, поэтому будет располагаться в том направлении, которое энергетически более выгодно. В случае тригональной бипирамиды – это экваториальное направление. То есть молекулу SCl_4 можно изобразить так:



Угол $\Theta < 180^\circ$, так как одно из направлений занято неподеленной \bar{e} -парой, а это приводит к искажению бипирамиды.

Пример 2. Установите геометрическое строение молекулы POCl_3 .

Решение:

А) Находим сумму электронов в валентной оболочке атома фосфора. На внешнем уровне в атоме фосфора $5\bar{e}$ ($\text{P } 3s^23p^3$). Атом кислорода, как валентный, поставляет в валентную оболочку атома фосфора два электрона, а каждый атом хлора - по одному электрону. Отсюда:

$$\Sigma \bar{e} = 5\bar{e} + 2\bar{e} + 3\bar{e} = 10\bar{e}.$$

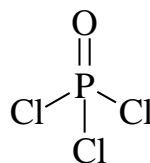
Б) Определяем сумму поделенных (n) и неподеленных (m) \bar{e} -пар, учитывая, что кратная связь равноценна одинарной (то есть исключаем π -связи):

$$n + m = \frac{10}{2} - 1 = 4.$$

В рассматриваемой молекуле одна π -связь, поэтому вычитаем из получившегося при делении числа единицу.

В) Определяем геометрическое строение молекулы.

$n+m=4$ - тетраэдр, $n = 4$, $m = 0$. Таким образом, строение следующее:



Из-за большого размера \bar{e} -облака двойной связи угол ClPCl меньше угла в правильном тетраэдре.

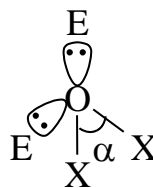
Пример 3. В какой из молекул H_2O или Cl_2O угол между связями O-X будет меньше? Почему?

Решение:

Общая формула рассматриваемых молекул OX_2E_2 , так как $\Sigma \bar{e} = 6\bar{e} + 2\bar{e} = 8\bar{e}$, где $6\bar{e}$ от атомов O , а $2\bar{e}$ от атомов X .

$$n + m = \frac{8}{2} = 4, \quad n = 2, \quad m = 2.$$

Электронные пары располагаются в форме тетраэдра:



Неподеленные \bar{e} -пары, занимая в пространстве больший объем, приводят к уменьшению угла α по сравнению с углом в правильном тетраэдре. Угол будет тем меньше, чем больше электроотрицательность атома X .

Электроотрицательность атома хлора больше электроотрицательности атома водорода.

Таким образом, угол между связями O–Cl в молекуле Cl₂O меньше, чем угол между связями O–H в молекуле H₂O.

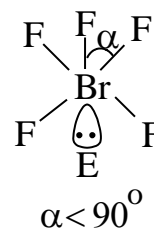
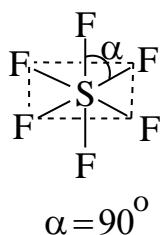
Пример 4. Сравните углы ХАХ в молекулах SF₆ и BrF₅.

Решение:

Общее число электронов в валентных оболочках центрального атома в этих молекулах одинаковое и равно 12, $n + m = 6$. Однако соотношение между m и n разное:

SF₆: $n = 6$, $m = 0$, то есть формула AF₆E₀ - неподеленных электронных пар нет, геометрическое строение - правильный октаэдр.

BrF₅: $n = 5$, $m = 1$, то есть формула AF₅E. Наличие неподеленной электронной пары приводит к уменьшению аксиально-экваториального угла FBrF в молекуле BrF₅ по сравнению с аналогичным углом FSF в молекуле SF₆.



Пример 5. Расположите в порядке возрастания валентного угла ХSХ молекулы SOF₄, SOCl₄.

Решение:

Обе молекулы имеют одинаковое строение тригональной бипирамиды, обе содержат кратную связь S=O (в экваториальной плоскости), которая занимает большой объем и приводит к уменьшению аксиального угла ХSХ. Это уменьшение больше в молекуле SOF₄, так как атом F более электроотрицателен, чем атом Cl, электроотрицательность фтора 13,62, электроотрицательность хлора 8,41.

Ответ: SOF₄ SOCl₄

увеличение аксиального валентного угла ХSХ.

2.Примеры решения задач по теме «Метод молекулярных орбиталей»

Пример 1.Рассмотрим молекулу HF.Электронная конфигурация атомов: Н 1s¹; F 1s²2s²2p⁵. 1s- и 2s-орбитали фтора значительно отличаются по энергии от 1s-орбитали водорода, поэтому, при качественном рассмотрении,

можно считать, что они сохраняют несвязывающий характер:

$$1s(F) = 1\sigma^{\text{несв.}}; \quad 2s(F) = 2\sigma^{\text{несв.}}$$

2p-орбитали фтора близки по энергии с 1s-орбиталью водорода. Если принять межъядерную ось за ось x, то с 1s-орбиталью водорода будет комбинироваться 2p_x-орбиталь фтора:

$$3\sigma^{\text{св.}} = 1s(H) + 2p_x(F); \quad 4\sigma^* = 1s(H) - 2p_x(F).$$

2p_y- и 2p_z-орбитали фтора отличаются от 1s-орбитали водорода по симметрии, поэтому образуют две вырожденные несвязывающие орбитали π-типа:

$$1\pi^{\text{несв.}} = 2p_y(F); \quad 1\pi^{\text{несв.}} = 2p_z(F).$$

При классификации МО обычно не указывают АО, из которых они образованы, а сохраняют только тип (σ, π ...) МО и ее порядковый номер внутри данного типа.

Количественный расчет молекулы HF показывает, что в образовании орбиталей 1σ и 2σ вносят вклад и другие атомные орбитали, однако он незначителен и при качественном рассмотрении может не учитываться:

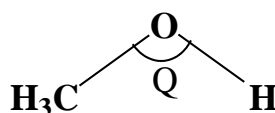
$$1\sigma = 0.997 (1s F) + 0.013 (2s F) + 0.002 (2p_x F) - 0.031 (1s H)$$

$$2\sigma = 0.955 (2s F) - 0.24 (1s F) + 0.110 (2p_x F) + 0.160 (1s H).$$

3. Примеры решения задач по теме «Электрические и магнитные свойства»

Пример 1: Момент связи O–CH₃ равен 1.2Д. Момент связи O–H равен 1.51Д. Дипольный момент молекулы метилового спирта 1.69Д. Определить валентный угол COH в молекуле спирта.

Решение:



Воспользуемся формулой (1):

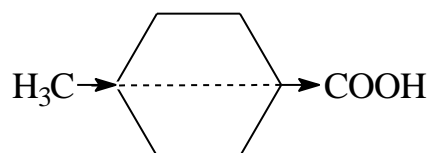
$$1.69 = \sqrt{1.51^2 + 1.2^2 + 2 \cdot 1.51 \cdot 1.2 \cdot \cos Q};$$

$$\cos Q = -0.238; \quad Q = 103^\circ 48'.$$

Пример 2: Рассчитать дипольные моменты изомеров толуоловой кислоты CH₃C₆H₄COOH, если дипольный момент группы CH₃ в бензольном ядре равен +0.4Д, а дипольный момент группы COOH в бензольном ядре равен -0.9Д.

Решение:

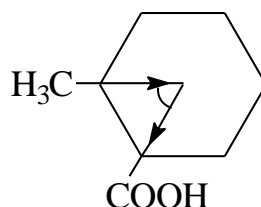
А) Пара-изомер:



Вектор CH_3 направлен к центру бензольного ядра, вектор COOH – от центра ядра. Направление векторов совпадает.

$$\mu = \mu_1 + \mu_2 \quad \mu = 0.4 + 0.9 = 1.3 \text{ Д.}$$

Б) Орто-изомер:

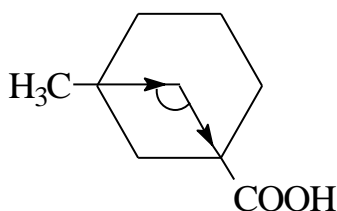


Угол между двумя моментами:

$$Q = 60^\circ \quad \cos 60^\circ = 0.5.$$

$$\mu = \sqrt{0.4^2 + 0.9^2 + 2 \cdot 0.4 \cdot (-0.9) \cdot 0.5} = 0.78 \text{ Д.}$$

В) Мета-изомер:



В этом случае угол:

$$Q = 120^\circ \quad \cos Q = -0.5.$$

$$\mu = \sqrt{0.4^2 + 0.9^2 + 2 \cdot 0.4 \cdot (-0.9) \cdot (-0.5)} = 1.153 \text{ Д.}$$

4. Примеры решения задач по теме: «Вращательное и колебательное движения»

Пример 1: В спектре ИИ начало основной полосы лежит при $4.29 \cdot 10^{-4}$ см, начало следующей полосы, отвечающей первому "обертону", при $2.28 \cdot 10^{-4}$ см. Определите основную частоту колебаний молекулы ИИ, фактор ангармоничности и энергию диссоциации на атомы, если атом I получается возбужденным.

Энергия возбуждения 21.65 ккал/моль.

Решение:

Воспользуемся формулами (11) и (12) для частоты колебаний. Предварительно определим частоту основной полосы ν_1 и первого обертона:

$$\nu_1 = \frac{1}{4.29 \cdot 10^{-4} \text{ см}} = 2331.0 \text{ см}^{-1}; \quad \nu_2 = \frac{1}{2.28 \cdot 10^{-4} \text{ см}} = 4380.6 \text{ см}^{-1}.$$

Подставив ν_1 и ν_2 в формулы (11) и (12), получим:

$$2331.0 \text{ см}^{-1} = \omega_0 \cdot (1 - 2x); \quad 4380.6 \text{ см}^{-1} = 2\omega_0 \cdot (1 - 3x).$$

Решая эти уравнения совместно, находим:

$$x = 0.0172; \quad \omega_0 = 2309.5 \text{ см}^{-1}.$$

ν_1, ν_2, ω_0 в данном случае выражены в обратных сантиметрах. Умножая величину ω_0 на скорость света, равную $2.998 \cdot 10^{10}$ см/с, получим:

$$\omega_0 = 6.924 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}.$$

Энергию диссоциации рассчитаем по формуле (14):

$$D = \frac{6.924 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-1}}{4 \times 1.72 \cdot 10^{-2}} = 1.006 \cdot 10^{15}.$$

Для 1 моль:

$$D = 6.02 \cdot 10^{23} \cdot 1.006 \cdot 10^{15} = 6.056 \cdot 10^{38}.$$

Энергия диссоциации на невозбужденные атомы:

$$D_H = D - E_{\text{возб.}}$$

Пример2: Во вращательном спектре HCl полоса, отвечающая вращательному квантовому числу $J' = 6$, находится при $68.95 \cdot 10^{-4}$ см. Определить момент инерции молекулы и расстояние между ядрами.

Решение:

Определяем момент инерции, воспользовавшись формулой (5):

$$I = \frac{h}{4\pi^2 \cdot \nu} \cdot J'' = \frac{h}{4\pi^2 \cdot \nu} \cdot (J'+1)$$

Частота $\nu = \frac{C}{\lambda}$, где C - скорость света ($2.998 \cdot 10^{10}$ см/с);

λ - длина волны (дана в условии).

$$\nu = \frac{2.998 \cdot 10^{10} \text{ см/с}}{68.95 \cdot 10^{-4} \text{ см}} = 4.348 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$$

Подставим полученное значение в выражение для момента инерции:

$$I = \frac{6.624 \cdot 10^{-27} \cdot (6+1)}{4 \cdot (3.142)^2 \cdot 4.348 \cdot 10^{12}} = 2.7 \cdot 10^{-40}.$$

Межъядерное расстояние определяем по формуле (7):

$$r = \sqrt{\frac{I \cdot (m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}},$$

$$m_H = 1.65 \cdot 10^{-24} \text{ г},$$

$$m_{Cl} = 35.46 \cdot 1.65 \cdot 10^{-24} = 58.51 \cdot 10^{-24} \text{ г},$$

$$r = \sqrt{\frac{2.7 \cdot 10^{-40} \cdot (1.65 + 35.46 \cdot 1.65) \cdot 10^{-24}}{1.65 \cdot 10^{-24} \cdot 35.46 \cdot 1.65 \cdot 10^{-24}}} = 1.3 \cdot 10^{-8} \text{ см}.$$

Принимая, что атомы тесно соприкасаются в молекуле, ее диаметр (d) равен 2r:

$$d = 2 \cdot 1.3 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 2.6 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 2.6 \text{ \AA}.$$

Это неплохо согласуется с экспериментальными данными, полученными из вязкости газа – 2.56 \AA° .

Домашние задания для подготовки к контрольным работам

1. Контрольная работа по теории ОЭПВО

12. Объясните и помощью основных положений теории ОЭПВО правило полярности, согласно которому в структурах молекул AX_5 , AX_4E , AX_3E_2 , производных от тригональной бипирамиды, более электроотрицательные лиганды всегда занимают аксиальные положения, и аксиальные связи удлинены по сравнению с экваториальными?

13. Определите геометрическое строение молекул: а) PCl_3 , SnCl_2 , IF_5 , ClF_3 , $[\text{ICl}_2]^-$, $[\text{ICl}_4]^-$, SCl_4 ; б) BeCl_2 , BCl_3 , CH_4 , PCl_5 , SCl_6 , XeF_6 ; в) COCl_2 , SOF_4 , TeO_2 , HNO_2 , H_2SO_4 , SO_2F_2 , IOF_5 ; г) SF_3N , $\text{CH}\equiv\text{CH}$

14. Сравните углы XAX в молекулах PF_5 и ClF_3 . В какой из этих молекул он больше и почему?

15. Даны молекулы PI_3 , PBr_3 , PCl_3 , PF_3 . Определите, какое из указанных ниже значений валентного угла относится к каждой из этих молекул: 102° ; $101,5^\circ$; $97,8^\circ$; $100,3^\circ$?

16. Сопоставьте значения валентных углов CPC , CPF (экваториальная плоскость), FPF в молекуле $(\text{CH}_3)_2\text{PF}_3$.

17. Сравните углы XAX в молекулах PCl_3 и CCl_4 . В какой молекуле он больше?

18. Угол HCH в молекуле $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ равен $116,8^\circ$, а угол HCC - 122° . Объясните данный факт.

19. Валентные углы в молекуле Cl_2CO имеют значение $111,3^\circ$ и $124,3^\circ$. Определите, какое из этих значений относится к углу ClCCl и какое к углу OCCl .

20. Расположите в порядке возрастания валентного угла XPX молекулы POF_3 , POCl_3 , POBr_3 .

21. Угол ONO в ионах $[\text{NO}_2]^+$ и $[\text{NO}_2]^-$ соответственно 180° и 115° . Объясните данный факт.

22. В какой молекуле валентный угол больше: в H_2O или OF_2 ?

2. Контрольная работа по теме: «Метод МО»

1. Записать волновые функции МО и построить энергетические диаграммы следующих молекул: CO , CN^-

2. Сравнить устойчивость и длину связей в молекулах N_2 , N_2^+ и N_2^- , используя метод МО.

3. Записать волновые функции МО и построить энергетические диаграммы следующих молекул: H_2O , NH_3 , CH_4 .

3. Контрольная работа по теме: «Электрические и магнитные

свойства»

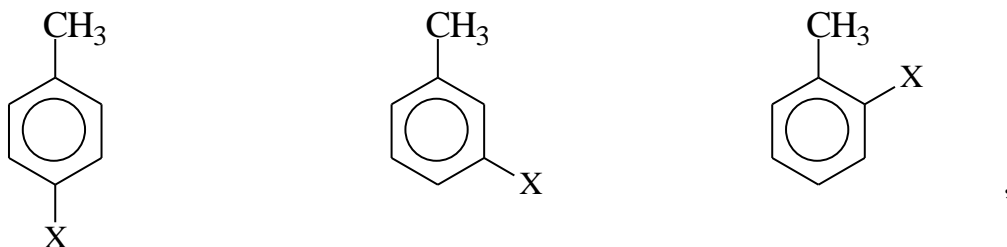
1. Дипольный момент связи O–H в воде равен 1.58Д. Определить величину валентного угла в молекуле H₂O, если ее дипольный момент равен 1.84.

2. Рассчитать дипольный момент молекулы H₂S, если дипольный момент связи S–H равен 0.68Д, а валентный угол равен 82°.

3. Дипольный момент молекулы Cl₂O равен 0.78Д. Рассчитать дипольный момент связи, если валентный угол в молекуле Cl₂O равен 115°.

4. Дипольные моменты бромбензола C₆H₅Br и толуола C₆H₅CH₃ соответственно равны 1.52Д и 0.4Д. При измерении дипольных моментов изомеров бромтолуола получены значения $\mu = 1.44\text{Д}$ и $\mu = 1.75\text{Д}$. Какие изомеры были исследованы?

5. Рассчитать дипольные моменты двузамещенных производных бензола типа:



где $x = \text{Br}, \text{CN}, \text{NO}_2, \text{NH}_2, \text{OH}$, если дипольный момент C₆H₅CH₃ равен 0.4, а дипольные моменты замещающих групп соответственно равны:

	Br	NO ₂	CN	NH ₂	OH
$\mu(\text{Д})$	-1.52	-3.96	-3.92	+1.53	-

1.56.

6. Используя представление о симметрии, определите, какие из перечисленных ниже молекул являются полярными, а какие неполярными: HCN, NOCl, NH₃, AlF₃, H₂S, COCl₂, H₂O, SiH₄, CF₄, CO₂.

7. Объясните, почему транс-изомер дихлорэтилена неполярен, а цис-изомер – полярен.

8. Рассчитайте поляризуемость следующих молекул: 2,2-диметилбутан; 2,3-диметилпентан; 2,2,3-триметилпентан.

9. Расположите в ряд в порядке возрастания поляризуемости следующие ионы: Na⁺, Al³⁺, Mg²⁺, O²⁻, F⁻.

10. Расположите в порядке уменьшения поляризуемости молекулы HI, HF, HBr, HCl.

11. Используя поляризационную теорию, объясните причину термической нестойкости молекул CaCO₃ и CuCO₃. Какая из них термически более стойкая? Почему?

12. Объясните причину немонотонного изменения термической устойчивости карбонатов щелочных металлов: от Li_2CO_3 до K_2CO_3 она возрастает, а от K_2CO_3 до Cs_2CO_3 – падает. Почему?

13. Используя поляризационную теорию, объясните, почему от мышьяка к висмуту увеличивается устойчивость соединений со степенью окисления "+3" и падает устойчивость соединений атомов этих элементов со степенью окисления "+5".

14. Рассмотрите закономерности изменения устойчивости соединений элементов подгруппы ванадия (V, Nb, Ta) со степенями окисления "+3" и "+5".

4. Контрольная работа по теме: «Вращательное и колебательное движения»

1. Изучение ИК-вращательного спектра газообразного HF дает для вращательной постоянной значение $B = 41.14 \text{ см}^{-1}$. Рассчитать значение энергии вращения для состояний, отвечающих вращательным квантовым числам 1, 2, 3, 4, 5. Вычислить величину кванта энергии, возбуждающего переход молекулы с данного уровня на соседний.

Решить аналогичную задачу для HCl, если $B = 20.83 \text{ см}^{-1}$.

Решить аналогичную задачу для HBr, если $B = 16.70 \text{ см}^{-1}$.

Решить аналогичную задачу для HI, если $B = 12.84 \text{ см}^{-1}$.

2. Воспользовавшись условием задачи 1, рассчитать момент инерции и межъядерные расстояния в молекуле HF. Приняв, что атомы в молекуле находятся в тесном контакте, сравнить значение диаметра, полученное из спектральных данных, со значением "газокинетического" диаметра $d = 2.34 \cdot 10^{-8} \text{ см}$.

Решить аналогичную задачу для HCl, если $d = 2.56 \text{ \AA}$.

Решить аналогичную задачу для HBr, если $d = 2.84 \text{ \AA}$.

Решить аналогичную задачу для HI, если $d = 3.24 \text{ \AA}$.

3. Первая полоса в колебательном спектре поглощения газообразного лежит при $3.46 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, вторая - при $1.76 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, третья - при $1.15 \cdot 10^{-4} \text{ см}$. Найти значение фактора ангармоничности χ и ω_0 - основную частоту колебаний молекулы.

Решить аналогичную задачу для молекулы CO. Первая полоса - при $4.67 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, вторая - при $2.35 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, третья - при $1.57 \cdot 10^{-4} \text{ см}$.

4. Воспользовавшись решением задачи 3, рассчитать энергию диссоциации молекулы HCl и энергию, отвечающую переходу молекулы HCl из основного состояния с $\nu = 0$ в состояние с $\nu = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.

Решить аналогичную задачу для молекулы CO.

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы

Студенты опрашиваются устно на консультациях согласно графику, оцениваются по пятибалльной системе.

Оценка «Отлично»

- А) Задание выполнено полностью.
- Б) Отчет/ответ составлен грамотно.
- В) Ответы на вопросы полные и грамотные.
- Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Хорошо»

- А), Б) - те же, что и при оценке «Отлично».
- В) Неточности в ответах на вопросы, которые исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан и усвоен.

Оценка «Удовлетворительно»

- А), Б - те же, что и при оценке «Отлично».
- В) Неточности в ответах на вопросы, которые не всегда исправляются после уточняющих вопросов.

Г) Материал понят, осознан, но усвоен не достаточно полно.

Оценка «Неудовлетворительно»

- А) Программа не выполнена полностью.
- Б) Устный отчет и ответы на вопросы не полные и не грамотные.
- В) Материал не понят, не осознан и не усвоен.

Критерии оценивания решения задач.

В решении и объяснении нет ошибок. Ход решения рациональный.
Если необходимо, решение произведено несколькими способами.

VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционная аудитория (мультимедийный проектор, настенный экран, ноутбук). Наглядные пособия: периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева.

VIII. Фонд оценочных средств

I. Паспорт оценочных средств по дисциплине «Строение вещества с элементами квантовой химии»

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3)	Знает	Классические и квантово-механические законы, описывающие строение вещества, расчетно-теоретические методы, связанные со строением свойства вещества;
	Умеет	Применять знания законов для решения практических, в том числе расчетных задач, связанных со строением вещества;
	Владеет	Инструментами и методами определения строения атомов и молекул с использованием современной вычислительной техники;
ОПК-4 Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	Знает	Квантово-механические принципы, лежащие в основе концепции атомных и молекулярных орбиталей, квантовую теорию образования химической связи и зависимость свойств вещества от типа связи; источники информации по данной области знаний;
	Умеет	Планировать работу по применению системы фундаментальных химических понятий, связанных со строением вещества, для решения научно-исследовательских задач;
	Владеет	Системой фундаментальных химических понятий, необходимых для планирования работы по установлению строения вещества;

п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства - наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
	Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики. Раздел 1. Основные	ОПК-3, ОПК - 4	Знает	Сдача коллоквиумов №№1-2(УО-2) Проверка усвоения	Экзаменационные вопросы №№ 1-19.

<p>постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Тема 1. Волновая функция, состояние Тема 2. Формализм квантовой механики, операторы. Тема 3. Уравнение Шредингера. Тема 4. Методы решения квантово-механических задач. Тема 5. Простейшие задачи квантовой механики. Тема 6. Волновая функция атома водорода. Раздел 2. Многоэлектронный атом; приближенные методы решения квантово-механических задач. Тема 1. Многоэлектронный атом. Тема 2. Метод Хартри-Фока. Тема 3. Электронная корреляция. Тема 4. Теория функционала плотности. Раздел 3. Квантовая химия молекул и теория химической связи. Тема 1. Гамильтониан молекулы. Тема 2. Метод</p>		<p>материала на занятиях №№1-11, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).</p>	
	Умеет	<p>Проверка усвоения материала на занятиях №№1-11, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).</p>	
	Владеет	<p>Контрольные работы №№1-3 (ПР-2).</p>	

молекулярных орбиталей.
Раздел 4.
Поверхность потенциальной энергии (ППЭ); пути и энергетика химической реакции.
Тема 1.
Поверхность потенциальной энергии.
Тема 2. Колебания молекул.

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 1. Введение.
Классические и квантово-механические теории строения молекул.

Тема 1.
Теоретические основы учения о строении химических частиц.

Тема 2. Основы современной теории химического строения.

Тема 3. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки.

Тема 4.
Приближенные методы решения волнового уравнения.

Раздел 2. Геометрия молекул.

Энергетическая характеристика молекул.

Тема 2. Метод МО

Хюккеля. Тема 3. Диаграммы Уолша.				
<p>Модуль 2. Строение вещества. Раздел 2. Геометрия молекул. Энергетическая характеристика молекул. Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях. Раздел 3. Электрические и магнитные свойства молекулярных систем и их использование для изучения строения молекул. Тема 1. Магнитный момент. Магнитная восприимчивость. Тема 2. Использование магнитных свойств при изучении строения молекул. Тема 3. Дипольный момент. Тема 4. Поляризуемость молекул. Раздел 4. Внутримолекулярное движение и электромагнитные спектры. Тема 1. Вращательное движение. Тема 2. Вращательные спектры. Тема 3. Колебательное движение и колебательный спектр. Тема 4. Молекула - ангармонический осциллятор. Тема 5.</p>	ОПК-3, ОПК - 4	Знает	Сдача коллоквиума №№ 3-4(УО-2). Проверка усвоения материала на занятиях №№12-18, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).	Экзаменационные вопросы №№ 20-50.
		Умеет	Проверка усвоения материала на занятиях №№12-18, Собеседование(УО-1). Тестовый контроль(ПР-1).	
		Владеет	Контрольные работы №№4-6 (ПР-2).	

<p>Колебательные спектры комбинационного рассеяния. Колебательные спектры многоатомных молекул. Раздел 5. Комплексные соединения. Межмолекулярные взаимодействия. Строение конденсированных фаз. Тема 1. Комплексные соединения. Тема 2. Межмолекулярные взаимодействия. Тема 3. Агрегатное состояние вещества.</p>				
---	--	--	--	--

II. Шкала оценивания уровня сформированности компетенций по дисциплине «Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики»

Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Наименование категории (группы) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Общепрофессиональные навыки	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, связанных со строением и свойствами вещества; ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение, вычислительную технику при решении задач, связанных со строением атомов и молекул:

<p>Физико-математическая и компьютерная грамотность при решении профессиональной деятельности</p>	<p>ОПК-4 Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</p>	<p>ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при обработке результатов, связанных со строением и химической активностью молекул ОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик ОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений о строении атомов и молекул</p>
---	--	---

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции		критерии	показатели
<p>Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);</p>	<p>знает (пороговый уровень)</p>	<p>Классические и квантово-механические законы, описывающие строение вещества, расчетно-теоретические методы, связанные со строением свойства вещества;</p>	<p>Знать классические теории строения молекул и основных постулатов квантовой механики. Знать принципы квантово-механического описания и расчета многоэлектронных систем (атомов и молекул). Знать квантово-химические подходы к определению реакционной способности соединений.</p>	<p>ОПК-3.1. Знает теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности, связанных со строением атомов и молекул; ОПК-3.2. Знает стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности, связанных со строением атомов и молекул;</p>

			<p>Знать современные методы расчета энергий и структурных параметров молекулы.</p> <p>Знать теории отталкивания электронных пар валентной оболочки.</p>	
	умеет (продвинутой)	<p>Применять знания законов для решения практических, в том числе расчетных задач, связанных со строением вещества;</p>	<p>Уметь решать простейшие типовые задачи с помощью теории строения многоэлектронного атома.</p> <p>Уметь объяснять строение молекул с позиций классической и квантовой теорий.</p>	<p>ОПК-3.3.</p> <p>Умеет применять теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности, связанных со строением атомов и молекул;</p>
	владеет (высокий)	<p>Инструментальными методами определения строения атомов и молекул</p>	<p>Владеть навыками построения и решения волнового уравнения приближенными методами.</p> <p>Владеть навыками установления геометрического строения молекул</p>	<p>ОПК-3.4.</p> <p>Способен использовать стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности, связанных со строением атомов и молекул;</p>

ОПК-4 Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	знает (пороговый уровень)	Квантово-механические принципы, лежащие в основе концепции атомных и молекулярных орбиталей, квантовую теорию образования химической связи и зависимость свойств вещества от типа связи; источники информации по данной области знаний;	Знать концепции атомных и молекулярных орбиталей. Знать понятия «атомные и молекулярные термины». Знать понятия «поверхности потенциальной энергии и пути реакции». Знать электрические и магнитные свойства и их зависимости от строения. Знать виды внутримолекулярного движения и связанных с ним спектров. Знать виды межмолекулярного взаимодействия. Знать строение конденсированных фаз.	ОПК-4-1. Знает правила проведения первичного поиска информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных), связанной со строением атомов, молекул, вещества;
	умеет (продвинутый)	Планировать работу по применению системы фундаментальных химических понятий, связанных со строением вещества	Уметь объяснять строение вещества на основе его свойств и объяснять свойства вещества, исходя из его строения	ОПК-4-2. Умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике для планирования работы по применению системы фундаментальных химических понятий, связанных со строением вещества.
	владеет (высокий)	Системой фундаментальных химических понятий, необходимых для установления строения вещества;;	Владеть Системой фундаментальных химических понятий, необходимых для планирования работы по установлению строения	ОПК-4.3. Способен использовать систему фундаментальных химических понятий, необходимых для планирования работы по установлению

			вещества;	строения вещества;
--	--	--	-----------	-----------------------

Методические рекомендации, определяющие процедуры оценивания результатов освоения дисциплины

I. Промежуточная аттестация студентов. Промежуточная аттестация студентов по дисциплине проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

К аттестации по дисциплине допускаются студенты, выполнившие все практические работы и защитившие отчеты по ним.

Примерный перечень оценочных средств (ОС)

Устный опрос

1. Экзамен (Средство промежуточного контроля) – Вопросы к экзамену, образцы билетов.

Вопросы к экзамену

Модуль 1. Квантовая химия и квантовая механика

1. Волновая функция. Вероятность нахождения квантовой системы в элементе конфигурационного пространства. Плотность вероятности нахождения квантовых частиц в пространстве. Условие нормировки волновой функции. Свойства волновой функции.

2. Операторы физических величин (постулат). Свойства операторов физических величин. Операторы основных физических величин.

3. Собственные значения и собственные функции операторов. Спектр оператора, вырожденные состояния, кратность вырождения.

4. Алгебра операторов.

5. Среднее значение физической величины.

6. Принцип суперпозиции состояний.

7. Принцип неопределенности Гейзенберга. Соотношения неопределенностей для координаты и импульса.

8. Уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для стационарного состояния.

9. Решение уравнения Шредингера для частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (энергетические уровни, волновая функция частицы).

10. Радиальные функции атома водорода. Узловые точки.

11. Сферические гармоники.

12. Вариационная теорема, вариационный метод Ритца.

13. Метод Хартри (эффективный потенциал, волновая функция Хартри, энергия в методе Хартри, остоновый и кулоновский интегралы, уравнения Хартри, метод самосогласованного поля).
14. Определитель Слэтера. Принцип Паули. Обменная энергия.
15. Метод Хартри-Фока (полная энергия, уравнения Хартри-Фока). Теорема Купманса.
16. Спин-орбитальное взаимодействие. Квантовые числа многоэлектронного атома.
17. Атомные термы в приближении LS-связи. Правила Хунда. Определение терма основного состояния.
18. Энергетические уровни многоэлектронного атома. Атом в магнитном поле. Эффекты Зеемана и Пашена-Бака.
19. Приближение Борна – Оппенгеймера. Общий вид гамильтониана молекулы. Электронная волновая функция.
20. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана.
21. Молекула водорода по методу МО ЛКАО.
22. Базисные наборы (функции Слэтера, функции Гаусса, базисы Попла и Даннинга, поляризационные и диффузные функции, хартри-фоковский предел).
23. Корреляционная энергия, методы учета корреляционной энергии.
24. Теорема Гельмана – Фейнмана. Образование химической связи.
25. Поверхность потенциальной энергии. Стационарные точки ППЭ. Гессиан.
26. Химическая реакция в терминах ППЭ. Координата реакции. Путь минимальной энергии. Седловая точка. Переходное состояние. Энергия активации.

Вопросы к экзамену

Модуль 2. Строение вещества.

Классические теории строения молекул.

1. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки.
2. Гетеронуклеарные двухатомные молекулы в методе МОЛКАО.
3. Использование симметрии молекул для построения МО многоатомных молекул.
4. Молекула H_2O . Делокализованные молекулярные орбитали.
5. Молекула H_2O . Локализованные МО.
6. Молекула NH_3 . Волновые функции. Энергетическая диаграмма.
7. Молекула CH_4 . Делокализованные МО. Энергетическая диаграмма.
8. Молекула CH_4 . Локализованные МО.
9. Диаграммы Уолша.

10. Основные положения метода Хюккеля.
11. Этилен. Строение. Волновые функции. Энергия МО.
12. Понятия электронной плотности и заряда на атоме в методе Хюккеля.
13. Порядок связи в МО Хюккеля. Индекс свободной валентности.
14. Молекула аллила в методе Хюккеля.
15. Молекула бензола в методе Хюккеля.
16. Особенности строения и свойств ароматических соединений.
17. Циклобутадиен в методе Хюккеля.
18. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях.
19. Происхождение магнитных моментов. Парамагнетизм и диамагнетизм.
20. Магнитная восприимчивость и магнитные моменты.
21. Использование магнитных свойств для изучения строения молекул.
22. Энергия молекулы в магнитном поле. Расщепление вырожденных уровней энергии.
23. Электрический дипольный момент. Его экспериментальное определение. Уравнение Ланжевена-Дебая.
24. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов. Примеры.
25. Поляризуемость молекул. Тензор поляризуемости. Изменение поляризуемости в зависимости от строения атома и молекулы. Расчет по аддитивной схеме.
26. Поляризация теория Фаянса.
27. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекул.
28. Внутримолекулярное движение. Вращательные уровни энергии (приближение жесткого ротатора).
29. Вращательный спектр поглощения двухатомной молекулы. Определение молекулярных параметров.
30. Колебательное движение молекул. Нормальные колебания. Их число, тип, симметрия.
31. Колебательное движение двухатомной молекулы. Приближение гармонического осциллятора. Система уровней гармонического осциллятора.
32. Правила отбора и спектр гармонического осциллятора. Недостатки этой модели.
33. Молекула - ангармонический осциллятор. Правила отбора и спектр поглощения ангармонического осциллятора.

34. Определение молекулярных параметров двухатомных молекул из колебательных ИК-спектров.
35. Колебательный спектр комбинационного рассеяния.
36. Правила отбора и спектр многоатомной молекулы.
37. Энергия диссоциации. Вычисление энергии диссоциации из спектров.
38. Карбонилы металлов. Состав. Строение по методу валентных связей.
39. Строение комплексных соединений по методу МО. Молекулярные орбитали σ -типа.
40. Строение карбониллов металлов по методу МО. Молекулярные орбитали π -типа.
41. Общая характеристика межмолекулярного взаимодействия. Ориентационное взаимодействие.
42. Индукционное межмолекулярное взаимодействие.
43. Дисперсионное межмолекулярное взаимодействие.
44. Взаимосвязь сил Ван-дер-Ваальса. Ван-дер-Ваальсовы молекулы. Ион-молекулярное взаимодействие.
45. Водородная связь.
46. Кристаллическое состояние вещества:
 - Элементарные кристаллы;
 - Кристаллы с ковалентной связью;
 - Ионные кристаллы.
47. Аморфное, жидкое и газообразное состояние вещества.
49. Интерметаллиды.
50. Стекла.

Образцы экзаменационных билетов

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**«Дальневосточный федеральный университет»**

Школа естественных наук

ООП 04.03.01-ХимияДисциплина Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механикиФорма обучения очнаяСеместр 5 2021 - 2022 учебного годаРеализующая кафедра Общей, неорганической и элементоорганической химии**Экзаменационный билет № 1**1. Классическая теория строения молекул. Химический аспект.2. Молекула- ангармонический осцилятор. Правила отбора и спектр ангармонического осциллятора.

3. Решить задачу

Заведующая кафедрой

Капустина А.А.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**«Дальневосточный федеральный университет»**

Школа естественных наук

ООП 04.03.01-ХимияДисциплина Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механикиФорма обучения очнаяСеместр 5 2021 - 2022 учебного годаРеализующая кафедра Общей, неорганической и элементоорганической химии**Экзаменационный билет № 3**1. Водородная связь.2. Понятие электронной плотности и заряда на атоме в ММО Хюккеля.

3. Решить задачу

Заведующая кафедрой

Капустина А.А.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Дальневосточный федеральный университет»

Школа _естественных наук_

ООП 04.03.01-Химия

Дисциплина Строение вещества с основами квантовой химии и квантовой механики

Форма обучения очная

Семестр 5 2021 - 2022 учебного года

Реализующая кафедра Общей, неорганической и элементоорганической химии

Экзаменационный билет № 4

1. Молярная рефракция. Использование ее для установления строения молекул.

2. Колебательное движение двухатомной молекулы. Приближение гармонического осциллятора. Система уровней гармонического осциллятора.

3. Решить задачу

Заведующая кафедрой

А.А. Капустина

II. Текущая аттестация студентов. Текущая аттестация студентов по дисциплине проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

Примерный перечень оценочных средств (ОС)

I. Устный опрос

1. Коллоквиум (УО-2) (Средство контроля усвоения учебного материала темы, раздела или разделов дисциплины, организованное как учебное занятие в виде собеседования преподавателя с обучающимися.)- Вопросы по темам/разделам дисциплины (в соответствии с рейтинговой системой оценки знаний).

2.Собеседование (УО-1) (Средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.) - Вопросы по темам/разделам дисциплины.

Планы коллоквиумов

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 1. Введение. Классические и квантово-механические теории строения молекул.

Коллоквиум № 1

1. Классические теории строения молекул.

2. Основные идеи метода молекулярных орбиталей. Вариационный метод решения уравнения Шредингера.

3. Молекула H_2^+ в методе МОЛКАО. Нахождение энергии. Энергетическая диаграмма.

4. Молекула H_2^+ в методе МОЛКАО. Построение волновых функций, их анализ.

5. Интерпретация понятий кулоновского, резонансного интегралов и интеграла перекрывания.

6. Расчет устойчивости различных конфигураций H_3^+ .

7. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки.

8. Гетеронуклеарные двухатомные молекулы в методе МОЛКАО.

9. Использование симметрии молекул для построения МО многоатомных молекул.

10. Молекула H_2O . Делокализованные молекулярные орбитали.

11. Молекула H_2O . Локализованные МО.

12. Молекула NH_3 . Волновые функции. Энергетическая диаграмма.

13. Молекула CH_4 . Делокализованные МО. Энергетическая диаграмма.

14. Молекула CH_4 . Локализованные МО.

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 2. Геометрия молекул. Энергетическая характеристика молекул.

Коллоквиум № 2

1. Диаграммы Уолша.

2. Основные положения метода Хюккеля.

3. Этилен. Строение. Волновые функции. Энергия МО.

4. Понятия электронной плотности и заряда на атоме в методе Хюккеля.

5. Порядок связи в МО Хюккеля. Индекс свободной валентности.

6. Молекула аллила в методе Хюккеля.

7. Молекула бензола в методе Хюккеля.

8. Особенности строения и свойств ароматических соединений.

9. Циклобутadiен в методе Хюккеля.

10. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях.

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 3. Электрические и магнитные свойства молекулярных систем и их использование для изучения строения молекул.

Коллоквиум № 3

1. Происхождение магнитных моментов. Парамагнетизм и диамагнетизм.

2. Магнитная восприимчивость и магнитные моменты.

3. Использование магнитных свойств для изучения строения молекул.

4. Энергия молекулы в магнитном поле. Расщепление вырожденных уровней энергии.

5. Электрический дипольный момент. Его экспериментальное определение. Уравнение Ланжевена-Дебая.

6. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов. Примеры.

7. Поляризуемость молекул. Тензор поляризуемости. Изменение поляризуемости в зависимости от строения атома и молекулы. Расчет по аддитивной схеме.

8. Поляризационная теория Фаянса.

9. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекул.

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 4. Внутримолекулярное движение и электромагнитные спектры.

Раздел 5. Комплексные соединения. Межмолекулярные взаимодействия. Строение конденсированных фаз.

Коллоквиум № 4

1. Внутримолекулярное движение. Вращательные уровни энергии (приближение жесткого ротатора).

2. Вращательный спектр поглощения двухатомной молекулы. Определение молекулярных параметров.

3. Колебательное движение молекул. Нормальные колебания. Их число, тип, симметрия.

4. Колебательное движение двухатомной молекулы. Приближение гармонического осциллятора. Система уровней гармонического осциллятора.

5. Правила отбора и спектр гармонического осциллятора. Недостатки этой модели.

6. Молекула - ангармонический осциллятор. Правила отбора и спектр поглощения ангармонического осциллятора.

7. Определение молекулярных параметров двухатомных молекул из колебательных ИК-спектров.

8. Колебательный спектр комбинационного рассеяния.

9. Правила отбора и спектр многоатомной молекулы.

10. Энергия диссоциации. Вычисление энергии диссоциации из спектров.

11. Карбонилы металлов. Состав. Строение по методу валентных связей.

12. Строение комплексных соединений по методу МО. Молекулярные орбитали σ -типа.

13. Строение карбониллов металлов по методу МО. Молекулярные орбитали π -типа.
14. Общая характеристика межмолекулярного взаимодействия. Ориентационное взаимодействие.
15. Индукционное межмолекулярное взаимодействие.
16. Дисперсионное межмолекулярное взаимодействие.
17. Взаимосвязь сил Ван-дер-Ваальса. Ван-дер-Ваальсовы молекулы. Ион-молекулярное взаимодействие.
18. Водородная связь.
19. Кристаллическое состояние вещества:
Элементарные кристаллы;
Кристаллы с ковалентной связью;
Ионные кристаллы.
20. Аморфное, жидкое и газообразное состояние вещества.
21. Интерметаллиды.
22. Стекла.

Вопросы собеседований

Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики.

Раздел 1. Основные постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики.

Тема 1. Постулаты квантовой механики. Функция состояния.

1. Сформулируйте постулат о состоянии квантовой системы. Что такое волновая функция? От чего она зависит?
2. Квантовое состояние системы описывается волновой функцией $\psi(q, t)$. Напишите условие нормировки этой волновой функции на единицу.
3. Почему волновые свойства частиц обнаружены в явлениях атомного масштаба? Можно ли в рамках квантовой теории описывать движения макротел?
4. Приведите пример эксперимента, показывающего невозможность классического описания движения микрочастицы.
5. Каким условиям должна удовлетворять волновая функция частицы?

Тема 2. Формализм квантовой механики. Операторы.

1. Какой физический смысл имеют стандартные условия: непрерывности, однозначности, ортогональности, нормированности ψ ?
2. Напишите условие ортонормированности функций.
3. Чем отличается плотность вероятности от вероятности? Какова вероятность найти частицу в точке x_0, y_0, z_0 ?
4. Пусть частица находится в состоянии ψ . Какова должна быть эта

функция, чтобы некоторая физическая величина в результате измерения не давала разброса значений?

Тема 3. Уравнение Шредингера.

1. Какой физический смысл имеет величина E в уравнении Шредингера для стационарных состояний?
2. Для каких систем допустимо использование стационарного уравнения Шредингера? Приведите примеры.
3. Каковы границы применимости уравнения Шредингера.

Тема 4. Приближенные методы решения квантово-механических задач.

1. Точное решение уравнения Шредингера может быть получено лишь для весьма ограниченного круга задач. Как можно использовать существующие математические методы приближенного решения уравнений для задач квантовой химии?
2. Докажите вариационную теорему.
3. Вывод секулярного уравнения в вариационном методе Ритца.

Тема 5. Простейшие задачи квантовой механики.

1. Получить решение уравнения Шредингера для частицы в потенциальной яме.
2. Найти собственные значения энергии и собственные функции для частицы в трехмерном «потенциальном ящике».
3. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер.
4. Чем характеризуется величина туннельного эффекта?
5. Почему задачу о движении электрона в атоме водорода удастся решить точно, а для атома гелия это невозможно?
6. Рассчитайте первые три энергетических уровня π -системы сопряженных полиенов в модели одноэлектронного приближения.

Тема 6. Волновая функция атома водорода.

1. Запишите наиболее общий вид волновой функции, описывающий электрон в поле протона. Почему угловая часть этой функции зависит от квантовых чисел l и m ? Почему радиальная часть данной функции зависит от n и l ?
2. Нарисуйте радиальные функции атома водорода $1s$, $2s$, $2p$, $3s$.
3. Нарисуйте радиальные функции распределения атома водорода $1s$, $2s$, $2p$.
4. Объясните возникновение спектральных серий Лаймана, Бальмера, Пашена.

5. В атоме водорода уровни энергии электрона при $n > 1$ вырождены по орбитальному квантовому числу l , а в многоэлектронных атомах это вырождение снимается. Почему?

6. Зная вид волновой функции атома водорода, получите следующие важные характеристики: среднее расстояние между ядром и электроном, наиболее вероятное расстояние, зависимость вероятности нахождения электрона от расстояния до ядра (радиальная функция распределения).

Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики.

Раздел 2. Многоэлектронный атом; приближенные методы решения квантово-механических задач.

Тема 1. Многоэлектронный атом.

1. Что такое одноэлектронное приближение?
2. Что такое электронная конфигурация? Однократно- или двукратно-возбужденная электронная конфигурация?
3. В чем сущность метода Хартри? Запишите оператор потенциальной энергии i -го электрона в методе Хартри.
4. В чем смысл метода самосогласованного поля? Что понимается под самосогласованным полем?
5. Будет ли полная электронная энергия в методе Хартри равна сумме энергий, занятых орбиталей? Почему?
6. Гамильтониан многоэлектронного атома имеет более сложный вид за счет появления оператора межэлектронного взаимодействия. Какие проблемы возникают в связи с этим, и какие решения предложены в современных методах квантовой химии?

Тема 2. Метод Хартри-Фока.

1. Волновая функция в методе Хартри противоречит принципу Паули. Каким образом можно построить волновую функцию, удовлетворяющую принципу антисимметричности волновой функции фермионов?
2. Какой вид приобретают уравнения электронной энергии, если волновая функция представлена в виде определителя Слейтера?
3. Какое основное отличие заложено в метод Хартри-Фока по сравнению с методом Хартри?
4. Что такое остоновая энергия молекулы в методе Хартри-Фока?
5. Какие экспериментальные возможности существуют для проверки теоремы Купманса?

Тема 3. Электронная корреляция.

1. Что понимают под электронной корреляцией? Что такое дырка Ферми? Учитывает ли корреляцию метод Хартри-Фока? Какую?
2. Почему методы учета корреляционной энергии иногда называют пост-хартри-фоковскими?
3. Расшифруйте и объясните аббревиатуры MP4, CISD, CCSDT.
4. В методе Хартри-Фока не учитывается скоррелированность движения электронов в каждый момент времени. Каким образом в современных методах квантовой химии компенсируется корреляционная энергия?

Тема 4. Теория функционала плотности.

1. Нахождение многоэлектронной волновой функции связано с серьезными вычислительными сложностями. Можно ли рассчитать параметры молекулярной системы, не зная явный вид волновой функции, а используя, например, электронную плотность?
2. Назовите обменный и корреляционный функционалы в составе B3LYP.
3. SVWN, PBE, BLYP, B3LYP. Какие из перечисленных функционалов относятся к градиент-корректированным, какие из них являются гибридными?
4. Что означает термин *ab initio*? Какие квантово-химические методы подходят под это определение?

Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики.

Раздел 3. Квантовая химия молекул и теория химической связи.

Тема 1. Гамильтониан молекулы.

1. Можно ли полную волновую функцию молекулы выразить в виде произведения электронной и ядерной функций?
2. Что называют орбиталью, спин-орбиталью, атомной орбиталью, молекулярной орбиталью?
3. Из чего складывается полная энергия молекулы в приближении Борна-Оппенгеймера? Запишите гамильтонианы электронного и ядерного взаимодействия.

Тема 2. Метод молекулярных орбиталей.

1. Пусть число базисных орбиталей - n . Оцените число интегралов, которые нужно вычислить для задания матриц уравнения Рутаана.
2. Объясните физический смысл величины интегралов перекрывания.
3. Получите уравнения Рутаана используя вариационный метод.
4. Какие преимущества и недостатки заключаются в способе представления МО как линейной комбинации АО?

Модуль 1. Основы квантовой химии и квантовой механики.

Раздел 4. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ); пути и энергетика химической реакции.

Тема 1. Поверхность потенциальной энергии.

1. Какие подходы используются в квантовой химии для описания динамических процессов в квантовой системе, например, для описания химической реакции?

2. Нарисуйте кривые аттрактивного и репульсивного взаимодействия двухатомной молекулы.

3. Какие типы критических точек выделяют на ППЭ?

4. Какие значения имеют диагональные элементы гессиана для каждого типа критических точек?

Тема 2. Колебания молекул.

1. Каким образом, используя методы квантовой механики и квантовой химии, можно рассчитать свойства молекул, связанные с их колебательной энергией.

2. Объясните понятия полной энергии молекулы, электронной энергии, энергии нулевых колебаний.

3. Как осуществляется переход к нормальным колебаниям?

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 1. Введение. Классические и квантово-механические теории строения молекул.

Тема 1. Теоретические основы учения о строении химических частиц.

Тема 2. Основы современной теории химического строения.

1. Значение работ Франкланда.

2. Взаимосвязь работ Кекуле, Купера и А.М. Бутлерова.

3. Что включает в себя понятие «Молекулярные параметры»?

4. Энергия диссоциации и способы ее определения.

5. Объясните ход потенциальной кривой.

6. Методы определения межъядерного расстояния?

7. Сформулируйте основные постулаты квантовой механики.

8. В чем суть принципа неопределенности Гейзенберга.

9. Каким требованиям должна удовлетворять волновая функция.

10. Уравнение Шредингера для стационарного состояния.

Тема 3. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки.

1. Чем обуславливается конфигурация связей многовалентного атома (или иона)?

2. Назовите ориентации облаков \bar{e} -пар валентных орбиталей в пространстве в зависимости от их числа.

3. Как изменяется сила отталкивания \bar{e} -пар (E - неподеленная, X - поделенная) в валентной оболочке в ряду E-E \rightarrow E-X \rightarrow X-X? Вместо " \rightarrow " поставьте знак ">" или "<".

4. Почему с увеличением числа неподеленных \bar{e} -пар уменьшается валентный угол а однотипных молекулах?

5. Почему неподеленная электронная пара занимает а пространстве больший объем?

6. Объясните и помощью основных положений теории ОЭПВО правило полярности, согласно которому в структурах молекул AX₅, AX₄E, AX₃E₂, производных от тригональной бипирамиды, более электроотрицательные лиганды всегда занимают аксиальные положения, и аксиальные связи удлинены по сравнению с экваториальными?

Тема 4. Приближенные методы решения волнового уравнения.

1. По каким признакам классифицируют молекулярные орбитали?

2. Каков порядок расположения молекулярных орбиталей на энергетической шкале?

3. Записать волновые функции МО и построить энергетические диаграммы следующих молекул: HF, CO, CN⁺.

4. Точечные группы симметрии молекул. Операции симметрии.

5. Правило группового умножения.

6. Представления и характеры представлений точечных групп. Приводимые (ПП) и неприводимые представления(НП).

7. Составление таблицы НП для группы симметрии C_{2v}

8. Классификация молекулярных орбиталей многоатомных молекул.

9. Построение волновых функций МО и энергетических диаграмм для многоатомных молекул (H₂O, NH₃, CH₄).

10. Представление о делокализованных и локализованных МО, их использовании для описания одноэлектронных и коллективных свойств.

11. Что понимается под термином «делокализованная молекулярная орбиталь»?

12. Разберите строение молекулы CaH₂ по методу ММО.

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 2. Геометрия молекул. Энергетическая характеристика молекул.

Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях.

1. Сформулируйте принцип сохранения орбитальной симметрии.

2. Дайте определение согласованным, перициклическим реакциям. Приведите примеры.

3. Что такое супраповерхностное и антароповерхностное присоединение?

Примеры.

4. В чем заключается метод корреляционных диаграмм?

5. Рассмотрите с помощью корреляционных диаграмм реакцию димеризации этилена по типу $\pi_s^2 + \pi_s^2$ и по типу $\pi_s^2 + \pi_a^2$. Какая из них разрешена, а какая запрещена по симметрии?

6. Рассмотрите с помощью корреляционных диаграмм реакцию диенового синтеза (реакция Дильса-Альдера) – присоединение олефинов к диенам. Докажите, что она разрешена по симметрии.

Тема 2. Метод МО Хюккеля (МОХ).

1. Перечислите основные положения метода МОХ.

2. Рассчитайте энергию π -МО, используя метод МОХ, для молекул аллила, бензола, циклобутадиена и др.

3. Запишите волновые функции π -МО выше перечисленных молекул.

4. Объясните особенности ароматических соединений, используя метод МОХ. Правило Хюккеля.

5. Рассчитайте электронную плотность, заряд на атомах, порядок связи в молекулах аллила, бензола, циклобутадиена.

6. Рассчитанные по методу МОХ, π -МО бутадиена имеют вид:

$$\Psi_1 = 0.372 x_1 + 0.602 x_2 + 0.602 x_3 + 0.372 x_4$$

$$\Psi_2 = 0.602 x_1 + 0.372 x_2 - 0.372 x_3 - 0.602 x_4$$

$$\Psi_3 = 0.602 x_1 - 0.372 x_2 - 0.372 x_3 + 0.602 x_4$$

$$\Psi_4 = 0.372 x_1 - 0.602 x_2 + 0.602 x_3 - 0.372 x_4 .$$

Учитывая, что электронами заняты только первые две π -МО, рассчитайте электронные плотности на 3-ем и 4-ом атомах углерода и порядок связи между ними.

7. Циклобутадиен в методе ММО Хюккеля. Объяснение устойчивости и реакционной способности молекулы.

Тема 3. Диаграммы Уолша.

1. В чем заключается подход Уолша к описанию и предсказанию геометрической структуры молекул?

2. Постройте диаграмму Уолша для молекул состава AH_2 . Определите с помощью данной диаграммы, какие из перечисленных молекул будут угловыми, а какие линейными: BH_2 , CH_2 , H_2O , NH_2^+ .

3. Постройте диаграмму Уолша для молекул состава AH_3 . Определите с помощью данной диаграммы, какие из перечисленных ниже молекул будут плоскими, а какие пирамидальными: BF_3 , AlCl_3 , NF_3 , SF_3^+ , SnCl_3

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 3. Электрические и магнитные свойства молекулярных систем

и их использование для изучения строения молекул.

Тема 1. Магнитный момент. Магнитная восприимчивость.

Тема 2. Использование магнитных свойств при изучении строения молекул.

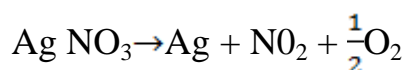
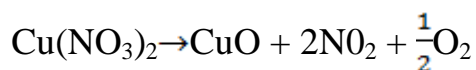
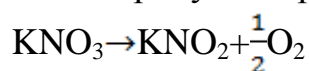
1. Чем обусловлены магнитные свойства вещества?
2. Какие вещества являются парамагнитными? В чем особенность парамагнетизма?
3. Диамагнетизм. Его особенности.
4. Магнитная восприимчивость и магнитные моменты.
5. Энергия молекулы в магнитном поле. Расщепление вырожденных уровней энергии.
6. Использование магнитных свойств при изучении строения молекул.
7. Спектральные методы, основанные на магнитных свойствах веществ.

Понятие об ЭПР- и ЯМР-методах.

Тема 3. Дипольный момент.

Тема 4. Поляризуемость молекул.

1. Дипольный момент. Физический смысл, методы определения.
2. Вычисление дипольного момента по аддитивной схеме.
3. Дипольный момент и симметрия молекул, полярные и неполярные молекулы.
4. Поляризуемость и ее зависимость от строения молекул; Эллипсоид поляризуемости;
5. Вычисление поляризуемости по аддитивной схеме;
6. Поляризационная теория;
7. Применение поляризационной теории для объяснения реакционной способности молекул.
8. Объяснить с точки зрения поляризационной теории почему получается различные продукты при термическом разложении нитратов:



Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 4. Внутримолекулярное движение и электромагнитные спектры.

Тема 1. Вращательное движение.

Тема 2. Вращательные спектры.

1. В какой области электромагнитного спектра проявляется вращательное движение?

2. Назовите правила отбора.

3. Решите следующие задачи:

4. . Изучение ИК-вращательного спектра газообразного HF дает для вращательной постоянной значение $B = 41.14 \text{ см}^{-1}$. Рассчитать значение энергии вращения для состояний, отвечающих вращательным квантовым числам 1, 2, 3, 4, 5. Вычислить величину кванта энергии, возбуждающего переход молекулы с данного уровня на соседний.

5. Решить аналогичную задачу для HCl, если $B = 20.83 \text{ см}^{-1}$.

6. Решить аналогичную задачу для HBr, если $B = 16.70 \text{ см}^{-1}$.

7. Решить аналогичную задачу для HI, если $B = 12.84 \text{ см}^{-1}$.

Тема 3. Колебательное движение и колебательный спектр.

1. Нормальные колебания: число, тип, симметрия, энергия.

2. Колебательное движение (приближение гармонического осциллятора). Силовая постоянная. Колебательное квантовое число. Уровни энергии гармонического осциллятора.

2. Колебательный спектр поглощения и испускания. Правила отбора.

3. Достоинства и недостатки модели гармонического осциллятора.

Тема 4. Молекула - ангармонический осциллятор.

Тема 5. Колебательные спектры комбинационного рассеяния.

Колебательные спектры многоатомных молекул.

1. Потенциал Морзе. Уровни энергии ангармонического осциллятора.

2. Правила отбора и спектр ангармонического осциллятора.

3. Определения молекулярных параметров из колебательно-вращательных спектров.

4. Что такое комбинационное рассеяние?

5. Условия, при которых нормальные колебания активны в ИК и КР спектрах. Приведите примеры.

6. В чем особенности колебательных спектров многоатомных молекул?

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 5. Комплексные соединения. Межмолекулярные взаимодействия. Строение конденсированных фаз.

Тема 1. Комплексные соединения.

1. Какие комплексы называются комплексами π -акцепторного типа? Их классификация.

2. Правило 18 электронов (правило Сиджвига). Примеры.

3. Рассмотрите образование связи в комплексе $[\text{Fe}(\text{CO})_9]$, используя метод валентных связей.

4. Запишите волновые функции МО σ -типа для комплекса $[\text{Cr}(\text{CO})_6]$. Постройте энергетическую диаграмму.

5. Покажите образование π -МО того же комплекса.

6. Сущность теории кристаллического поля. Ее достоинства и недостатки.

Тема 2. Межмолекулярные взаимодействия.

1. Какие виды межмолекулярного взаимодействия существуют?

2. Какие виды межмолекулярного взаимодействия зависят от температуры?

3. Чем кривая межмолекулярного взаимодействия отличается от потенциальной кривой молекулы?

4. Что такое Ван - дер - ваальсовы молекулы? Условия их существования.

5. В чем сущность ион - молекулярного взаимодействия?

Тема 3. Агрегатное состояние вещества.

1. Дать характеристику кристаллического состояния вещества:

- Элементарные кристаллы;
- Кристаллы с ковалентной связью;
- Ионные кристаллы.

2. Природа водородной связи.

3. Аморфное, жидкое и газообразное состояние вещества.

4. Интерметаллиды. Состав. Строение.

5. Стекла. Состав. Строение.

II. Письменные работы

1. Тест (ПР-1) (Система стандартизированных заданий, позволяющая автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося) - Фонд тестовых заданий.

2. Контрольная работа (ПР-2) (Средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу) - Комплект контрольных заданий по вариантам.

Тестовые задания для текущей проверки

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 1. Введение. Классические и квантово-механические теории строения молекул.

Тема 3. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки.

Правильны ли ниже приведенные утверждения. Выберите ответ «да» или «нет».

1. Валентный угол в молекуле воды больше, чем в молекуле OF_2 .
2. Молекула BF_3 имеет пирамидальное строение.

3. Не поделённая электронная пара занимает в пространстве больший объём, чем поделённая.
4. Молекула CO_2 имеет угловое строение.
5. Валентные углы в молекулах NH_3 и NCl_3 одинаковые
6. Молекула COCl_2 имеет треугольное строение
7. Валентные углы OCCl и ClCCl в молекуле COCl_2 одинаковые.
8. Кратная связь занимает в пространстве больший объём, чем одинарная.
9. Валентные углы в молекуле PCl_3 больше, чем в молекуле CCl_4 .
10. Молекулы CO_2 и SO_2 имеют разное строение.

Модуль 2. Строение вещества.

Раздел 1. Введение. Классические и квантово-механические теории строения молекул.

Тема 4.. Приближенные методы решения волнового уравнения.

Правильны ли ниже приведенные утверждения. Выберите ответ «да» или «нет».

1. Атомные орбитали, входящие в состав молекулярной орбитали должны быть одинаковой симметрии.
2. Атомные орбитали, входящие в состав молекулярной орбитали, должны быть разными по энергии.
3. Число молекулярных орбиталей не равно числу атомных, из которых они образовались.
4. На разрыхляющих орбиталях в молекуле кислорода есть неспаренные электроны, поэтому она парамагнитна.
5. Энергия разрыхляющей орбитали ниже, чем атомной.
6. Несвязывающая молекулярная орбиталь по энергии выше связывающей орбитали.
7. Делокализованные молекулярные орбитали молекулы воды являются трехцентровыми.
8. Атомные орбитали и образованные из них молекулярные орбитали относятся к разным неприводимым представлениям.
9. Из двух молекул с одинаковым порядком связи меньшую энергию диссоциации имеет та, у которой нет электронов на разрыхляющих орбиталях.
10. Делокализованные орбитали можно математически преобразовать в локализованные.

Контрольная работы (примеры)

Модуль 1. Квантовая химия и квантовая механика

Контрольная работа №1.

Вариант №1

1. Проверить линейность операторов \hat{Q} (возведение в квадрат), $\hat{D} = \frac{d}{dx}$, \hat{L}_y

2. Найти явный вид оператора

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)^3$$

3. Вычислить коммутатор $[\hat{L}_x, \hat{p}_z]$

Вариант №2

1. Проверить линейность операторов \hat{Q} (возведение в квадрат), $\hat{D} = \frac{d}{dy}$, \hat{p}_x

2. Найти явный вид оператора

$$\left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^3$$

3. Вычислить коммутатор $[\hat{L}_x, \hat{z}]$

Контрольная работа №2.**Вариант №1**

1. Доказать, что собственные значения эрмитова оператора являются вещественными числами.

2. Найти среднее значение импульса частицы в потенциальной яме шириной a с бесконечно высокими стенками.

3. Вычислить коммутатор $[\hat{p}_z, \hat{y}]$

Вариант №2

1. Доказать, что собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям эрмитова оператора, взаимно ортогональны.

2. Найти среднее значение координаты частицы в потенциальной яме шириной a с бесконечно высокими стенками.

3. Вычислить коммутатор $[\hat{p}_y, \hat{y}]$

Контрольная работа №3**Вариант №1**

1. Определить терм основного состояния атома Al (атомный номер 13)
2. Определить терм основного состояния атома Mn (атомный номер 25)
3. Определить, для какого атома терм основного состояния 3F_4

Вариант №2

1. Определить терм основного состояния атома F (атомный номер 9)
2. Определить терм основного состояния атома Sc (атомный номер 21)
3. Определить, для какого атома терм основного состояния ${}^4F_{9/2}$

Вариант №3

1. Определить терм основного состояния атома B (атомный номер 5)
2. Определить терм основного состояния атома Cu (атомный номер 29)
3. Определить, для какого атома терм основного состояния 5D_4

Вариант №4

1. Определить терм основного состояния атома Si (атомный номер 14)
2. Определить терм основного состояния атома S (атомный номер 16)
3. Определить, для какого атома терм основного состояния ${}^4F_{3/2}$

Модуль 2. Строение вещества.**Контрольная работа №1 (Теория Гиллеспи)****Вариант №1**

1. Геометрическое строение $SOCl_2$, PCl_3 , $SnCl_2$.
2. Валентные углы в молекуле $COCl_2$ имеют значения $111,3^\circ$ и $124,3^\circ$.

Какое из этих значений относится к углу $ClCCl$, а какое к углу $OCCl$?

Вариант №2

1. Геометрическое строение IF_5 , $IO(OH)_3$, SOF_4 .
2. Сравнить углы XAX в молекулах PF_5 и ClF_3 .

Вариант №3

1. Геометрическое строение SF_4 , TeO_2 , C_2H_2 .
2. Сравнить углы XAX в молекулах PCl_3 и CCl_4 .

Вариант №4

1. Геометрическое строение NOCl , XeF_6 , POCl_3 .
2. Даны молекулы PI_3 , PBr_3 , PCl_3 , PF_3 . Определить какое из указанных значений валентного угла относится к каждой из них: 102° ; $101,5^\circ$; $97,8^\circ$; $100,3^\circ$?

Вариант №5

1. Геометрическое строение COCl_2 , PCl_5 , SnCl_2
2. Объясните почему угол HCH в молекуле C_2H_4 равен $116,8^\circ$, а угол HCC – 120° ?

Вариант №6

1. Геометрическое строение IF_5 , $\text{IO}(\text{OH})_3$, SOF_4 .
2. Расположите в порядке возрастания валентного угла XPX молекулы POF_3 , POBr_3 , POCl_3 .

Вариант №7

1. Геометрическое строение SOF_4 , $(\text{ICl}_2)^-$, COCl_2
2. В какой молекуле валентный угол больше, в H_2O или OF_2 ? Почему?

Вариант №8

1. Геометрическое строение SF_6 , $(\text{ICl}_4)^-$, POCl_3 .
2. Сравните углы XSX в молекулах SCl_4 , SF_4 .

Вариант №9

1. Геометрическое строение COCl_2 , SF_4 , $(\text{BF}_4)^-$
2. Сравнить углы XAX в молекулах SCl_6 , BrCl_5 .

Контрольная работа №2 (Метод молекулярных орбиталей)**Вариант №1**

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму для молекул N_2 , CO (гетеронуклеарная схема), NH_3 .

Вариант №2

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму для молекул O_2 , H_2O , HCl .

Вариант №3

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму для молекул Cl_2 , CO (гомонуклеарная схема), PH_3 .

Вариант №4

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму для молекул C_2 , SiO , H_2S .

Вариант №5

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму

для молекул NO, O₂, NH₃.

Вариант №6

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму для молекул B₂, H₂O, BeH₂.

Вариант №7

1. Записать волновые функции МО и построить энергетическую диаграмму для молекул F₂, HF (гетеронуклеарная схема), PH₃.

Контрольная работа №3 (Метод Хюккеля)

Вариант №1

Молекулярные орбитали непредельного органического соединения:

$$\Psi_1 = \frac{1}{2} (P_{z1} + P_{z2} + P_{z3} + P_{z4}) \quad \downarrow \uparrow$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z1} - P_{z3}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z2} - P_{z4}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2} (P_{z1} - P_{z2} + P_{z3} - P_{z4})$$

Определить: P_{1,2}; P_{1,3}; q₁; q₂; F₁; F₂

Вариант №2

Молекулярные орбитали непредельного органического соединения:

$$\Psi_1 = \frac{1}{2} (P_{z1} + P_{z2} + P_{z3} + P_{z4}) \quad \downarrow \uparrow$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z1} - P_{z3}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z2} - P_{z4}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2} (P_{z1} - P_{z2} + P_{z3} - P_{z4})$$

Определить: P_{2,3}; P_{2,4}; q₃; q₄; F₃; F₄

Вариант №3

Молекулярные орбитали непредельного органического соединения:

$$\Psi_1 = \frac{1}{2} (P_{z1} + P_{z2} + P_{z3} + P_{z4}) \quad \downarrow \uparrow$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z1} - P_{z3}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z2} - P_{z4}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2} (P_{z1} - P_{z2} + P_{z3} - P_{z4})$$

Определить: P_{1,2}; P_{1,3}; q₁; q₂; F₁; F₂

Вариант №4

Молекулярные орбитали непредельного органического соединения:

$$\Psi_1 = \frac{1}{2} (P_{z1} + P_{z2} + P_{z3} + P_{z4}) \quad \downarrow \uparrow$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z1} - P_{z3}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_{z2} - P_{z4}) \quad \uparrow$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{2} (P_{z1} - P_{z2} + P_{z3} - P_{z4})$$

Определить: $P_{2,3}$; $P_{2,4}$; q_3 ; q_4 ; F_3 ; F_4

Контрольная работа №4 (Электрические и магнитные свойства)

Вариант №1

1. Рассчитать дипольный момент 1,2- дихлорбензола, если $\mu(\text{C-Cl}) = 1,59 \text{ Д}$ ($\cos 60^\circ = 0,5$)

2. Какие из указанных молекул полярны, а какие нет: SO_2 , NH_3 , H_2O ?

Ответ поясните.

3. Рассчитать среднюю поляризуемость молекулы $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$.

Вариант №2

1. Рассчитать дипольный момент 1,3- дибромбензола, если $\mu(\text{C-Br}) = 1,57 \text{ Д}$ ($\cos 120^\circ = -0,5$).

2. Какие из указанных молекул полярны, а какие нет: BF_3 , Cl_2CO , CH_4 ?

Ответ поясните.

3. Рассчитать среднюю поляризуемость молекулы



Вариант №3

1. Рассчитать дипольный момент 1-хлор,2-бромбензола, $\mu(\text{CCl}) = 1,59 \text{ Д}$, $\mu(\text{C-Br}) = 1,57 \text{ Д}$, ($\cos 60^\circ = 0,5$)

2. Какие из указанных молекул полярны, а какие нет: NOCl , C_2H_2 , CCl_4 ?

Ответ поясните.

3. Рассчитать среднюю поляризуемость молекулы $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$.

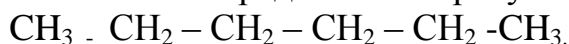
Вариант №4

1. Рассчитать дипольный момент 1-трифторметил-3- хлорбензола, если $\mu(\text{C-Cl}) = 1,59 \text{ Д}$, $\mu(\text{C-F}) = 2,54 \text{ Д}$ ($\cos 120^\circ = -0,5$)

2. Какие из указанных молекул полярны, а какие нет: HCN , AlCl_3 , H_2S ?

Ответ поясните.

3. Рассчитать среднюю поляризуемость молекулы



Контрольная работа №5 (Внутримолекулярное движение и электромагнитный спектр)

Вариант №1

1. Вращательная постоянная молекулы HF $B = 41,14 \text{ см}^{-1}$.

Рассчитать энергию вращения для основного состояния и межъядерное расстояние.

2. Основная полоса в колебательном спектре поглощения HCl лежит при $3,46 \cdot 10^{-4}$. Найти значение фактора ангармоничности и основную частоту колебаний молекулы.

Вариант №2

1. Вращательная постоянная молекулы HCl $B=20,83 \text{ см}^{-1}$.

Рассчитать энергию вращения для основного состояния и межъядерное расстояние.

2. Основная полоса в колебательном спектре поглощения CO лежит при $4,67 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, вторая при $2,35 \cdot 10^{-4} \text{ см}$. Найти значение фактора ангармоничности и основную частоту колебаний молекулы.

Вариант №3

1. Вращательная постоянная молекулы HBr равна $16,7 \text{ см}^{-1}$

Рассчитать энергию вращения для состояния, отвечающего квантовому числу $J=1$ и межъядерное расстояние.

2. Граница между сгущением колебательных полос и областью непрерывного спектра поглощения лежит для хлора при 4785 Å^0 . Рассчитать энергию диссоциации Cl_2 .

Вариант №4

1. Вращательная постоянная молекулы HI равна $12,84 \text{ см}^{-1}$.

Рассчитать энергию вращения для состояния, отвечающего квантовому числу $J=2$ и межъядерное расстояние.

2. Граница между сгущением колебательных полос и областью непрерывного спектра поглощения лежит для брома при $\lambda=5107 \text{ Å}^0$. Рассчитать энергию диссоциации этой молекулы.

Вариант №5

1. Во вращательном спектре молекулы HCl полоса, отвечающая квантовому числу $J=6$ находится при $68,95 \cdot 10^{-4} \text{ см}$.

Определить межъядерное расстояние молекулы.

2. Граница полосатого и непрерывного спектров молекулы I_2 лежит при 4995 Å^0 . Определить энергию диссоциации этой молекулы.

Критерии оценки знаний умений и навыков при текущей проверке

I. Оценка устных ответов:

Отметка "Отлично"

1. Дан полный и правильный ответ на основе изученных теорий.
2. Материал понят и изучен.

3. Материал изложен в определенной логической последовательности, литературным языком.

4. Ответ самостоятельный.

Отметка "Хорошо"

1, 2, 3, 4 – аналогично отметке "Отлично".

5. Допущены 2-3 несущественные ошибки, исправленные по требованию учителя, наблюдалась "шероховатость" в изложении материала.

Отметка "Удовлетворительно"

1. Учебный материал, в основном, изложен полно, но при этом допущены 1-2 существенные ошибки (например, неумение применять законы и теории к объяснению новых фактов).

2. Ответ неполный, хотя и соответствует требуемой глубине, построен несвязно.

Отметка "Неудовлетворительно"

1. Незнание или непонимание большей или наиболее существенной части учебного материала.

2. Допущены существенные ошибки, которые не исправляются после уточняющих вопросов, материал изложен несвязно.

II. Оценка умения решать задачи:

Отметка "Отлично"

1. В решении и объяснении нет ошибок.

2. Ход решения рациональный.

3. Если необходимо, решение произведено несколькими способами.

4. Допущены ошибки по невнимательности (оговорки, описки).

Отметка "Хорошо"

1. Существенных ошибок нет.

2. Допущены 1-2 несущественные ошибки или неполное объяснение, или использование 1 способа при заданных нескольких.

Отметка "Удовлетворительно"

1. Допущено не более одной существенной ошибки, записи неполны, неточности.

2. Решение выполнено с ошибками в математических расчетах.

Отметка "Неудовлетворительно"

1. Решение осуществлено только с помощью учителя.

2. Допущены существенные ошибки.

3. Решение и объяснение построены не верно.

III. Оценка письменных работ:

Критерии те же. Из оценок за каждый вопрос выводится средняя итоговая оценка за письменную работу.