

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце: Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 16.09.2022 15:36:58
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

18 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Строение вещества

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 2 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Виноградова М.Г. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Цель: познакомить студента с теоретическими основами учения о строении молекул, макротел и их свойствами.

Задачи дисциплины:

- ознакомить с основными теориями в области строения молекул;
- ознакомить с симметрией молекулярных систем;
- научить студентов пользоваться для конкретных целей теми знаниями, которые они приобретают в ходе изучения фундаментальных наук, других общепрофессиональных и специальных дисциплин, умению прослеживать многоуровневую связь различных природных факторов;
- повысить уровень профессиональной компетентности студентов посредством установления системы межпредметных связей содержания курса с содержанием профилирующих дисциплин.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Строение вещества» входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана. Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Физическая химия», "Квантовая механика и квантовая химия" и «Кристаллохимия».

3. Объем дисциплины: 3 зачетные единицы, 108 академических часов, в том числе:

контактная аудиторная работа; лекции - 34 часов, практические занятия – 17 часа;

контактная внеаудиторная работа: контроль самостоятельной работы – 20 часов;

самостоятельная работа: 37 часов.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции) | Планируемые результаты обучения по дисциплине |
|--|---|
| 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 |
| ОПК-4 Способен планировать работы | ОПК-4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с |

| | |
|---|---|
| химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач | использованием физических законов и представлений |
|---|---|

5. Форма промежуточной аттестации и семестр:
зачет в 3-м семестре.

6. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

| Учебная программа – наименование разделов и тем | Всего (час.) | Контактная работа (час.) | | | С а м о с т о я т е л ь н а я р а б о т а , в т о м ч и с л е к о н т |
|--|--------------|--------------------------|------------------------|---|---|
| | | Лекц ии | Практ ическ ие работ ы | Контро ль самосто ятельно й работы (в том числе курсова я работа) | |
| 1. Введение | 4 | 2 | 0 | 0 | 2 |
| 2. Теория химического строения | 11 | 4 | 1 | 2 | 4 |
| 3. Физические основы учения о строении молекул | 10 | 4 | 1 | 2 | 3 |
| 4. Симметрия молекулярных систем | 17 | 6 | 6 | 3 | 2 |
| 5. Геометрия молекул | 16 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 6. Средние энергетические свойства | 7 | 2 | 1 | 1 | 3 |
| 7. Электрические и магнитные свойства | 7 | 2 | 1 | 1 | 3 |
| 8. Уровни энергии и переходы между ними. Спектры | 14 | 4 | 1 | 3 | 6 |

| | | | | | |
|-----------------------------------|------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 9. Межмолекулярное взаимодействие | 9 | 2 | 1 | 2 | 4 |
| 10. Строение конденсированных фаз | 13 | 4 | 1 | 2 | 6 |
| ИТОГО: | 108 | 34 | 17 | 20 | 37 |

III. Образовательные технологии

| Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД) | Вид занятия | Образовательные технологии |
|---|--|---|
| 1. Введение | <ul style="list-style-type: none"> лекция | <ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) |
| 2. Теория химического строения | <ul style="list-style-type: none"> лекция решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 3. Физические основы учения о строении молекул | <ul style="list-style-type: none"> лекция решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 4. Симметрия молекулярных систем | <ul style="list-style-type: none"> лекция решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 5. Геометрия молекул | <ul style="list-style-type: none"> лекция решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 6. Средние энергетические свойства | <ul style="list-style-type: none"> лекция решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология модульного и блочно-модульного обучения |

| | | |
|--|--|--|
| 7. Электрические и магнитные свойства | <ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 8. Уровни энергии и переходы между ними. Спектры | <ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 9. Межмолекулярное взаимодействие | <ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения |
| 10. Строение конденсированных фаз | <ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений | <ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения |

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

РАССЧЕТ БАЛЛОВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «Строение вещества» 1 модуль

| № | Результат (индикатор) | Вид работы / способ | Критерии оценивания |
|---|-----------------------|-----------------------|---|
| 1 | ОПК-3.1 ОПК-4.3 | Контрольная работа №1 | 25 (4 задания, 4 балла за правильно решенное тестовое задание и 7 баллов за 1 правильный ответ на вопрос) |
| 2 | | | |
| 3 | | | |
| | | | |
| | | Посещаемость | 5 |
| | | Работа на занятии | 10 |
| | | Итого: | 40 |

2 модуль

| № | Результат (индикатор) | Вид работы / способ | Критерии оценивания |
|---|-----------------------|-----------------------|--|
| 1 | ОПК-3.1 ОПК-4.3 | Контрольная работа №2 | 45 (4 задания, 4 балла за правильно решенное тестовое задание 12 баллов за 1 правильно решенную задачу) |
| 2 | | | |
| 3 | | | |
| | | | |
| | | Посещаемость | 5 |
| | | Работа на занятии | 10 |
| | | Итого: | 60 |

Текущий контроль успеваемости

1 модуль

Контрольная работа №1. Темы: введение; теория химического строения; физические основы учения о строении молекул

Пример


Пример построения варианта заданий

Задание №1 (4 балла)

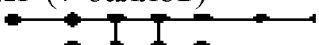
Структурные изомеры – это:

1. Вещества, имеющие одинаковый состав, но разное химическое строение
2. Соединения с одинаковым составом, но разным геометрическим строением
3. Соединения одного и того же класса (алканы, алкены, спирты и т.п.)

Задание №2 (7 баллов)

для  построить матрицу A

Задание №3 (7 баллов)

для  найти индексы p_3 и M_1 .

Задание №4 (7 баллов)

Изобразите изомеры октана (18)

2 модуль

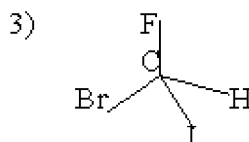
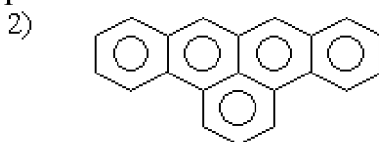
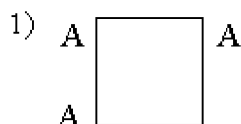
Контрольная работа № 2. Темы: Симметрия молекулярных систем; геометрия молекул; средние энергетические свойства ; электрические и магнитные свойства; уровни энергии и переходы между ними. Спектры; межмолекулярное взаимодействие; строение конденсированных фаз

Задание №1 (4 балла)

Определите, в каких случаях эллипсоид поляризуемости молекулы представляет собой эллипсоид вращения 1. H_2O , SF_4 , $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ 2. BCl_3 , XeF_4 , C_6H_6 (бензол). 3. CF_4 , SF_6 , C_8H_8 (кубан).

Задание №2 (12 баллов)

Определите точечную группу симметрии данных молекул и фигур. Какие из них являются хиральными?



Задание №3 (12 баллов)

Постройте схему МО для BH_2

Задание №4 (12 баллов)

Рассчитайте энергетические различия между конформерами н-Гексана (только для TTT , $\text{TGG}^{(2)}$, $\text{GTG}^{(1)}$, $\text{GTG}^{(2)}$, $\text{GGG}^{(1)}$, $\text{GGG}^{(2)}$, $\text{GGG}^{(3)}$) если (в кДж/моль) $\zeta_{\text{cc}}^g = 3,6$; $\nu_{\text{ccr}}^{\text{gg}} = 12,6$

Промежуточная аттестация

**Вопросы для подготовки к зачету по дисциплине
ПО ДИСЦИПЛИНЕ «Строение вещества»**

1. Химическое строение. Структурная изомерия.
2. Симметрия молекул (точечные группы).
3. Хиральность.
4. Stereoхимическое строение. Конфигурация и конформация.
5. Координация атомов около центрального атома (иона).
6. Геометрия молекул вида AX_p ($p = 2, 3, 4, \dots, 9$). Валентные состояния атомов.
7. Конфигурационная (оптическая и геометрическая) изомерия.
8. Конформационная (поворотная) изомерия.
9. Химическая и стереохимическая топология. Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.
10. Системы координат, используемые для описания молекулы как связанной совокупности атомов: Лабораторная система координат и системы центра масс (невращающаяся и вращающаяся).
11. Энергия молекулы в классической теории строения молекул: кинетическая (поступательная, вращательная, колебательная) и потенциальная.
12. Молекулярное уравнение Шредингера (для изолированной системы) и схема его разделения на отдельные части.

13. Энергетические состояния молекул: электронные, колебательные и вращательные. Характер "движения" ядер и электронов в стационарной квантовой механике молекул.
14. Потенциальная поверхность (кривая) молекулы. Критерий существования химической частицы как единого связного целого.
15. Основные понятия теории групп и теории представлений групп.
16. Теория групп в квантовой химии. Инвариантность гамильтониана. Волновые функции как базис представления группы.
17. Принципы классификации уровней энергии.
18. Симметрия атомных, групповых, молекулярных орбиталей.
19. Схемы образования МО ЛКАО из АО центрального атома и ГО лигандов.
20. Электронное строение типичных представителей неорганических, органических, элементоорганических и координационных соединений.
21. Энергия и Энтальпия образования молекулы. Связь со строением молекул.
22. Энергия связей и энергия разрыва связей.
23. Электрический дипольный момент. Полярные и неполярные молекулы.
24. Поляризуемость молекулы. Эллипсоид поляризуемости.
25. Магнитные моменты атомов и молекул.
26. Магнитная восприимчивость. Эллипсоид магнитной восприимчивости.
27. Двухатомная молекула как жесткий ротатор. Вращательные спектры.
28. Двухатомная молекула как гармонический осциллятор. Колебательно-вращательные спектры.
29. Электронные состояния молекул. Электронные спектры двухатомных молекул.
30. Спектры многоатомных молекул (общая характеристика).
31. Эффект Зеемана.
32. Спектры ЭПР и ЯМР.
33. Межмолекулярное взаимодействие (основные составляющие).
34. Строение конденсированных фаз. Жидкости и аморфные вещества. Мезофазы.
35. Кристаллы.

Шкала оценивания выполнения индикаторов:

Индикатор считается выполненным, если либо во время текущей, либо промежуточной аттестации студент набрал как минимум пороговое количество баллов за те виды активности, которые отвечают за данный индикатор.

| № | Индикатор | Текущая аттестация | |
|---|--------------------|--------------------|----------|
| | | Порог | Максимум |
| 1 | ОПК-3.1 ОПК-4.3 | 20 | 100 |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | | |
|--|--|--|--|

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Камышов В. М. Строение вещества / В. М. Камышов; Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. - Москва : Лань, 2017. – Электронный ресурс. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/90007>
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/437642> (дата обращения: 21.06.2021).

б) Дополнительная литература:

Строение вещества. Строение кристаллов. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана (Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана), 2010. - "Рекомендовано Научно-методическим советом МГТУ им. Н.Э. Баумана в качестве учебного пособия". – Электронный ресурс. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=52473

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com;
2. ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
3. ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

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

4. 1. Виртуальная образовательная среда ТвГУ (<http://moodle.tversu.ru>)
5. 2. Научная библиотека ТвГУ (<http://library.tversu.ru>)

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Программа дисциплины

«Строение вещества»

1. ВВЕДЕНИЕ

Особенности предмета изучения. Цель и задачи дисциплины. Её место в системе наук.

Классическая теория строения молекул. Квантовая теория. Современное учение о строении молекул.

Строение молекул и свойства и веществ.

2. ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

Основные положения теории химического строения. Валентность. Структурная изомерия.

Химическая топология. Координация атомов.

Хиральность. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация. Конформация. Пространственная изомерия.

Внутримолекулярные взаимодействия. Связь свойств веществ и строением молекул.

3. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ УЧЕНИЯ О СТРОЕНИИ МОЛЕКУЛ

Молекула как система материальных точек. Координаты.

Энергия молекулы в классической теории.

Молекулярное уравнение Шредингера.

Энергетические состояния молекул: поступательные, электронные, колебательные, вращательные.

4. СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Элементы и операции симметрии конечных фигур. Группы симметрии (точечные группы). Элементы теории групп. Представления групп и характеры. Систематика квантовых состояний молекул. Симметрия АО и МО.

5. ГЕОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛ

Понятие геометрической конфигурации. Геометрические параметры: межъядерные расстояния (длины связей), валентные и азимутальные углы. Закономерности в геометрической конфигурации.

Интерпретация геометрического строения на основе модели ОЭПВО, концепции гибридизации, теории МО ЛКАО.

6. СРЕДНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Энергия и энтальпия образования. Энтальпия образования и химическое строение. Энтальпия атомизации и средние энергии связей. Энергии разрыва связей.

7. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Электрический дипольный момент, его определение. Влияние симметрии. Векторная схема. Квадрупольный момент и высшие мультиполи.

Поляризуемость. Эллипсоид поляризуемости, его связь с симметрией молекул.

Магнитные свойства. Магнитная восприимчивость.

8. *УРОВНИ ЭНЕРГИИ И ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ НИМИ. СПЕКТРЫ*
Атомные термы. Электронные состояния линейных и нелинейных молекул. Потенциальная функция молекул. Функция Морзе.
Двухатомная молекула как гармонический осциллятор. Двухатомная молекула в ангармоническом приближении. Колебательные состояния многоатомных молекул. Нормальные колебания.
Двухатомная молекула как жесткий ротатор. Вращательные состояния многоатомных молекул. Эллипсоид энергии, его связь с симметрией молекул
Молекулярные спектры (вращательные, колебательно-вращательные, электронно-колебательно-вращательные). Определение молекулярных постоянных.
Магнитные взаимодействия. Эффект Зеемана. Магнитный резонанс: ЭПР и ЯМР.
9. *МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ*
Агрегатные состояния: газ, жидкость, твердое тело, плазма, нейтронное состояние, эиплазма.
Силы межмолекулярного взаимодействия (ориентационная, индукционная, дисперсионная составляющие). Силы отталкивания.
Электронное строение ряда молекул и молекулярных ионов.
Кривая потенциальной энергии взаимодействия двух частиц. Модельные потенциалы.
10. *СТРОЕНИЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ФАЗ*
Аморфные вещества.
Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Изоморфизм. Полиморфизм.
Симметрия кристаллов. Внешняя и внутренняя симметрия. Сингонии. Типы кристаллов.

Планы и методические указания по подготовке к практическим занятиям

Планы практических занятий и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Строение вещества» и предназначены для проведения практических занятий и для самостоятельной подготовки студентов.

Практические занятия по дисциплине «Строение вещества» являются одной из важнейших форм обучения студентов и проводятся с целью углубления и закрепления знаний, привития навыков поиска, обобщения и изложения материала.

Семинарские занятия могут проводиться следующими методами: «дискуссии», «деловых игр», упражнения и др.

Конкретный метод проведения каждого семинарского занятия накануне определяет преподаватель.

Темы практических занятий

1. *Химическое и стереохимическое строение*

Сtereoхимическая конфигурация и конформация. Основные типы изомерии.

2. *Симметрия молекул.*

Определение точечных групп симметрии (на моделях).

3. *Геометрия молекул*

Интерпретация геометрического строения на основе модели ОЭПВО, концепции гибридизации, теории МО ЛКАО.

4. *Внутреннее вращение*

Кривые внутреннего вращения (основные типы), их построение.

5. *Электрические и магнитные свойства*

Электрический дипольный момент, его определение и основные закономерности. Поляризуемость.

Магнитные моменты атомов и молекул (орбитальные, спиновые, полные). Магнитная восприимчивость.

6. *Уровни энергии и переходы между ними. Спектры*

Электронные состояния атомов и молекул. Их систематика.

Колебания и колебательные состояния двух- и многоатомные молекул в гармоническом и ангармоническом приближениях.

Вращение и вращательные состояния двухатомных и многоатомных молекул.

Спектры и строение двухатомны молекул.

Расщепление уровней энергии в магнитном поле. Магнитный резонанс: ЭПР и ЯМР

7. *Межмолекулярное взаимодействие*

Кривая потенциальной энергии взаимодействия двух частиц. Модельные потенциалы.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа по дисциплине «Строение вещества» проводится с целью углубления и закрепления, полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования.

Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу над ними. При конспектировании лекции рекомендуется на каждой странице оставлять поля для последующих записей в дополнение к конспекту.

При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на проблемные вопросы, поставленные преподавателем при чтении лекции, а также на его задание и рекомендации.

Перечень вопросов для самостоятельной работы

1. Введение

1.1. Квантовая теория.

1.2. Строение молекул и свойства и веществ.

2. Теория химического строения

- 2.1. Химическая топология. Координация атомов.
- 2.2. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация.
- 2.3. Связь свойств веществ и строением молекул
- 3. Физические основы учения о строении молекул**
 - 3.1. Молекула как система материальных точек.
 - 3.2. Энергия молекулы в классической теории.
 - 3.3. Молекулярное уравнение Шредингера.
- 4. Симметрия молекулярных систем**
 - 4.1. Элементы теории групп.
 - 4.2. Представления групп и характеры.
 - 4.3. Симметрия АО и МО.
- 5. Геометрия молекул**
 - 5.1. Закономерности в геометрической конфигурации.
 - 5.2. Интерпретация геометрического строения на основе теории МО ЛКАО.
- 6. Средние энергетические свойства**
 - 6.1. Энтальпия атомизации и средние энергии связей.
 - 6.2. Энергии разрыва связей.
- 7. Электрические и магнитные свойства**
 - 7.1. Квадрупольный момент и высшие мультиполи.
 - 7.2. Эллипсоид поляризуемости, его связь с симметрией молекул.
- 8. Уровни энергии и переходы между ними. Спектры**
 - 8.1. Функция Морзе.
 - 8.2. Нормальные колебания.
 - 8.3. Эффект Зеемана.
 - 8.4. Магнитный резонанс: ЭПР и ЯМР.
- 9. Межмолекулярное взаимодействие**
 - 9.1. Модельные потенциалы.
- 10. Строение конденсированных фаз**
 - 10.1. Аморфные вещества.
 - 10.2. Симметрия кристаллов.
 - 10.3. Типы кристаллов.

Рекомендации по подготовке к контрольным работам и зачёту

Самостоятельное изучение дисциплины целесообразно начинать, ознакомившись с программой дисциплины и требованиями к минимуму содержания, знаниям и умениям по данной дисциплине. Уяснив общую структуру курса, ознакомившись с зачетными вопросами, можно переходить к его поэтапному изучению, привлекая для этого материалы лекций и рекомендованную учебную литературу.

Изучая дисциплину, необходимо добиться полного усвоения ее теоретических основ, научиться применять теоретические знания для решения практических задач. Содержание незнакомых терминов, встретившихся в процессе освоения учебного материала, можно выяснить при помощи справочной литературы. Более сложные вопросы уточняются на консультациях с преподавателем кафедры.

Зачет по дисциплине включает:

- устный ответ на вопросы и выполнение контрольного задания;
- результаты рейтинг-контроля.

При ответе на вопросы следует четко знать определения, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами и графиками.

При оценке устного ответа на вопросы принимается во внимание:

1. полнота, глубина освещения вопроса, аргументированность изложения материала;
2. умение связывать теорию с практикой;
3. культура речи.

В ходе зачета преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

2. Типовые задания для оценивания результатов сформированности компетенции ОПК-3.1

Примерные типовые задания

1. Химическая топология изучает:

1. Молекулы с разной геометрической конфигураций.
2. Молекулы, отличающиеся типом химических связей.
3. Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мебиуса и другие такого рода образования.

2. Что такое лабораторная система координат, используемая для описания молекулы?

1. Внешняя неподвижная, фиксированная в пространстве система координат (система осей "наблюдателя")
 1. Система с началом в центре масс молекулы, параллельная внешней неподвижной системе.
 2. Система с началом в центре масс, жестко связанная с равновесной конфигурацией молекулы (и вращающаяся вместе с молекулой).

3. Одноэлектронное приближение - это:

- Предположение о независимом движении электрона в поле всех ядер и остальных электронов.
- Решение уравнения Шредингера для одноэлектронных задач (атом водорода, молекула-ион водорода).
- Представление МО в виде ЛКАО.

4. Что такое квадрат Кэли (в теории групп)?

1. Множество элементов группы.
2. Подмножество элементов группы, составляющих подгруппу.
3. Таблица умножения элементов группы.

5. Уровни МО (в обозначениях типов симметрии) в молекуле воды-это:

12. $1a_1 2a_1 b_2 3a_1 b_1$.

13. $1\sigma_g 2\sigma_g 1\sigma_u 1\pi_u$

14. $1a_1 2e 1b_2 1t$.

6. Спектры ЯМР (лежащие в радиочастотной области) возникают при переходах:

1. Между подуровнями зеемановского расщепления, обусловленного ядерными магнитными моментами.

2. Между уровнями энергии сверхтонкой структуры, обусловленной взаимодействием магнитных моментов ядер с магнитным полем электронов или квадрупольных моментов ядер с электрическим полем электронов.

3. Между уровнями энергии в атомных ядрах.

7. Определите, в каких случаях эллипсоид поляризуемости молекулы представляет собой: а) обычный трехосный эллипсоид, б) эллипсоид вращения, в) сферу:

1. H_2O , SF_4 , $CHFCIBr$, $HOCl$, $CH_2=CH_2$

2. BCl_3 , XeF_4 , PCl_5 , IF_7 , C_6H_6 (бензол).

3. CF_4 , SF_6 , C_8H_8 (кубан).

8. Определите, в каких случаях эллипсоид магнитной восприимчивости молекулы представляет собой: а) обычный трехосный эллипсоид, б) эллипсоид вращения, в) сферу:

1. NH_3 , H_3BO_3 , CH_3Cl , $CH_2=C=CH_2$ (аллен), C_6H_6 (призман).

2. H_2O_2 , CH_2ClBr , $CHCl=C=CHCl$, $C_{10}H_8$ (нафталин).

3. SiF_4 , P_4 (фосфор), $C_{20}H_{20}$ (додекаэдран).

9. У каких двухатомных молекул могут быть чисто вращательные и колебательно-вращательные спектры?

б. Только у полярных молекул.

2. У полярных и неполярных молекул.

3. У любых двухатомных молекул.

10. Какие из указанных вращающихся молекул (согласно их классификации) относятся к типу: А) сферического волчка, Б) симметричного волчка, В) асимметричного волчка?

1. H_2O , SF_4 , CH_2BrI , *транс*- $CHCl=CHCl$, $CH_2=CH_2$.

1. NH_3 , CH_3Br , BCl_3 , XeF_4 , IF_7 , C_6H_6 (призман, бензол).

2. CF_4 , P_4 (фосфор), SF_6 , C_8H_8 (кубан).

11. Спектры ЭПР (в микроволновой области) возникают в результате переходов:

1. Между подуровнями зеемановского расщепления, обусловленного электронными (орбитальными или спиновыми) магнитными моментами.

2. Между уровнями энергии тонкой структуры атомов или молекул, обусловленной спин-орбитальным взаимодействием электронов.

3. Между подуровнями расщепления в электрическом поле.

12. К какой области электромагнитного спектра принадлежат следующие переходы между уровнями энергии молекулы: А) электронный переход с $\lambda = 250$ нм, Б) колебательный переход с $\lambda = 12,5$ мкм, В) вращательный переход с $\lambda = 1,25$ мм?

1. Инфракрасной области.
2. Микроволновой области
3. Ультрафиолетовой области

3. Типовые задания для оценивания результатов сформированности компетенции ОПК-4.3

Примерные типовые задания

1. Что такое химическое строение?

- 4) Порядок (последовательность и кратность) связи атомов в молекуле.
- 5) Расположение атомов в пространстве.
- 6) Конфигурация молекулы.

2. Структурные изомеры - это:

1. Вещества, имеющие одинаковый состав, но разное химическое строение.
2. Соединения с одинаковым составом, но разным геометрическим строением.
3. Соединения одного и того же класса (алканы, алкены, спирты и т.п.).

3. Хиральность - это:

1. Асимметрия (отсутствие симметрии).
2. Нарушение симметрии.
3. Свойство объекта не быть тождественным зеркальному отображению.

4. Что такое стереохимическая конфигурация?

1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы.
2. Пространственное строение молекулы.
3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.

5. Что такое конформация?

1. Пространственные расположения, связанные с внутренним вращением вокруг простых (или более сложных) связей, деформацией валентных углов и т.д..
2. Хиральные расположения атомов (или атомных групп) в молекуле.
3. Ахиральные расположения атомов (или атомных групп) в молекуле.

6. Пространственные изомеры (стереоизомеры) образуют:

1. Молекулы, имеющие одинаковый состав, одинаковое химическое, но разное пространственное строение.
2. Молекулы с одинаковой геометрической конфигурацией (например, все тетраэдрические молекулы).
3. Оптические активные соединения.

7. Что такое средняя (термохимическая) энергия химической связи в многоатомной молекуле?

1. Энергия разрыва данной связи
2. Доля энергии образования молекулы, приходящаяся на данную связь в этой молекуле.
3. Доля энтальпии атомизации молекулы, приходящаяся на данную связь в этой молекуле.

8. Полярные молекулы - это:

1. Молекулы с постоянным электрическим дипольным моментом.
2. Молекулы с наведенным электрическим дипольным моментом.
3. Молекулы с полярными связями.

9. К каким группам симметрии относятся молекулы, имеющие собственные дипольные моменты?

1. C_n , C_{nv} .
2. D_n , D_{nh} , D_{nd}
3. T_d , O_h , I_h

10. Какие из указанных молекул имеют постоянные дипольные моменты?

1. H_2O , NH_3 , O_3 , SF_6 .
2. BCl_3 , CH_4 , XeF_4 , PCl_5 , IF_7 , $CH_2=CH_2$, C_6H_6 .
3. HCN , BrF_3 , SF_4 , IF_5 .

11. На каком утверждении основана классификация уровней?

1. Каждому уровню энергии можно сопоставить некоторое неприводимое представление группы.
2. Симметрия волновой функции не может быть выше симметрии гамильтониана системы.
3. Вырожденные уровни расщепляются при понижении симметрии.

12. Энергия молекулы - это:

1. Энергия образования ее из свободных атомов.
2. Энтальпия образования из элементов.
3. Теплота сгорания соединения.

VII. Материально-техническое обеспечение дисциплины

В ходе изучения дисциплины используется приборная база для проведения физико-химического анализа, которым располагают лаборатории кафедры физической химии химико-технологического факультета.

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

| №п.п. | Обновленный раздел рабочей программы дисциплины | Описание внесенных изменений | Реквизиты документа, утвердившего изменения |
|-------|---|--|---|
| 1. | Раздел I Аннотация. | Измены часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. | Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического |

| | | год | факультета |
|----|---|--|--|
| 2. | Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины | Дополнен список основной и дополнительной литературы | Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета |