

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 26.03.2025 10:13:16
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:

Проректор по ОДиМП

«2» сентября 2024 г.

Рабочая программа факультативной дисциплины (с аннотацией)
«Методы расчета свойств молекул и кристаллических структур»

для обучающихся программы аспирантуры

1.4.4. Физическая химия

Составитель:

Д.ф.-м.н., профессор Виноградова М.Г.

Тверь, 2024

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины

Цель и задачи дисциплины освоение основных с идей и методов стереохимии, составляющих теоретический фундамент современной химической науки.

Задачи дисциплины

1. раскрыть основные принципы стереохимии;
2. научить аспирантов применять полученные знания для решения конкретных проблем химии;
3. повысить уровень профессиональной компетентности аспирантов посредством установления системы межпредметных связей содержания курса с содержанием профилирующих дисциплин.

2. Место дисциплины в структуре ПА

Дисциплина является факультативной для подготовки аспирантов в области физической химии. Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Физическая химия», "Математическое моделирование в физической химии" .

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

контактная аудиторная работа:

лекции – 4 часа, практические занятия – 4 часа;

самостоятельная работа:

100 часов

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения программы аспирантуры

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)
--

ОПК-1 обладать способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий

УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития

ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно- прикладных задач

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения зачёт.

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.)		Самотельная работа (час.)
		Лекции	Практические (лабораторные) занятия	
1. Теория химического строения	11	1		10
2. Симметрия молекулярных систем	43	1	2	40
3. Геометрия молекул	32	1	1	30
4. Конформации молекул	22	1	1	20
ИТОГО	144	6	6	132

III. Образовательные технологии

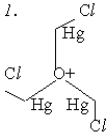
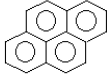
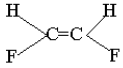
Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Теория химического строения	Лекция, практическое	Лекционные занятия с мультимедийными презентациями.
2. Симметрия молекулярных систем		
3. Геометрия молекул		

4. Конформации молекул		<p>Практические занятия с анализом спектральных данных и моделированием колебательных процессов.</p> <p>Выполнение самостоятельных исследовательских проектов по актуальным вопросам дисциплины.</p> <p>Обсуждение современных научных публикаций на семинарах.</p>
------------------------	--	---

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ОПК-1 обладать способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий

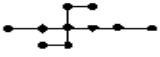
Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
<p>Кейс:</p> <p>1. Химическая топология изучает :</p> <p>а) Молекулы с разной геометрической конфигурацией</p> <p>б) Молекулы, отличающиеся типом химических связей</p> <p>в) Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мёбиуса и другие такого рода образования.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; • Имеется верное решение только части задания– 1</p>

<p>2. Что такое квадрат Кэли (в теории групп)?</p> <p>а) Множество элементов группы</p> <p>б) Подмножество элементов группы, составляющих подгруппу</p> <p>в) Таблица умножения элементов группы</p> <p>3. Что такое стереохимическая конфигурация?</p> <p>1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы.</p> <p>2. Пространственное строение молекулы.</p> <p>3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.</p>	<p>балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>1. Определите точечную группу симметрии данных молекул. Какие из них являются хиральными? К какой группе симметрии (высшей, средней или низшей) они относятся?</p> <p>1.  2)  3) </p> <p>2. Рассчитайте конформационные характеристики н-Гексана (только для ТТТ, ТТG) если (в кДж/моль) $\square_{cc}^g = 3,6$; $\square_{ccr}^{gg} = 12,6$</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>

<p>1. К структурной изомерии относятся:</p> <p>а) оптическая изомерия;</p> <p>б) изомерия скелета;</p> <p>в) геометрическая изомерия;</p> <p>г) поворотная изомерия.</p> <p>2. Что такое химическое строение?</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Порядок (последовательность и кратность) связи атомов в молекуле. 2. Расположение атомов в пространстве. 3. Конфигурация молекулы. <p>3. Пространственные изомеры (стереоизомеры) образуют:</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. 	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»</p>

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития

<p>Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</p>	<p>Показатели и критерии оценивания</p>
--	--

	компетенции, шкала оценивания
<p>Кейс:</p> <p>1. Химическая топология изучает :</p> <p>а) Молекулы с разной геометрической конфигурацией</p> <p>б) Молекулы, отличающиеся типом химических связей</p> <p>в) Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мёбиуса и другие такого рода образования.</p> <p>2. Что такое квадрат Кэли (в теории групп)?</p> <p>а) Множество элементов группы</p> <p>б) Подмножество элементов группы, составляющих подгруппу</p> <p>в) Таблица умножения элементов группы</p> <p>3. Что такое стереохимическая конфигурация?</p> <p>1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы.</p> <p>2. Пространственное строение молекулы.</p> <p>3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; •</p> <p>Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Для графа  построить матрицу D и найти индексы ρ_3 и W.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего</p>

	<p>смысла– 2 балла; • Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Что такое математическая модель</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики (вместе с граничными и начальными условиями). 2. Определенное математическое выражение, описывающее изучаемый процесс или явление. 3. Исходные предпосылки в постановке задачи. <p>Общая погрешность решения задачи складывается из:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Погрешности математической модели; 2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель; 3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности. <p>3. Схема Фаянса для алканов имеет вид</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $PC_nH_{2n+2} = (n-1)pc-c + (2n+2)pc-n .$ 2. $PC_nH_{2n+2} = (n-1)pc-c + (2n+2)pn .$ 3. $PC_nH_{2n+2} = (n)pc + (2n+2)pn .$ 	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»</p>

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных задач

<p align="center">Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</p>	<p align="center">Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания</p>
<p>1. К каким группам симметрии относятся молекулы, имеющие собственные дипольные моменты?</p> <p>1. C_n, C_{nv}.</p> <p>2. D_n, D_{nh}, D_{nd}</p> <p>3. T_d, O_h, I_h</p> <p>2. Центр симметрии есть в:</p> <p>а) треугольнике;</p> <p>б) пятиугольнике;</p> <p>в) шестиугольнике; г) тетраэдре.</p> <p>3. Элементы симметрии конечных фигур – это:</p> <p>а) ось симметрии, плоскость и центр симметрии, зеркально-поворотная ось;</p> <p>б) поворот, отражение;</p> <p>в) винтовые оси;</p> <p>г) плоскости скользящего отражения.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; •</p> <p>Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Общая погрешность решения задачи складывается из:</p> <p>1. Погрешности математической модели;</p> <p>2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель;</p> <p>3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности.</p> <p>2. Коэффициент диффузии при моделировании методом молекулярной динамики может быть рассчитан из уравнения Эйнштейна-Смолохувского и как инте-</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; •</p> <p>Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3</p>

<p>гнал от автокорреляционной функции скорости. Почему обычно использую первый способ и как это реализуется.</p>	<p>балла – «5»</p>
<p>1. Наиболее распространённым программным продуктом для визуализации молекулярных структур является:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. RasMol 2. Origin 3. HyperChem 4. MolMol <p>2. Укажите правильное основное предназначение программ из пакета MS Office (например а-2)</p> <ol style="list-style-type: none"> а. Word б. Excel в. Access г. Power Point д. Outlook е. Publisher <ol style="list-style-type: none"> 1. настольная издательская система, предназначена для создания профессионально оформленных публикаций; 2. система управления базами данных, предназначена для организации работы с большими объемами данных; 3. табличный процессор, предназначен для обработки табличных данных и выполнения сложных вычислений; 4. текстовый процессор, предназначен для создания и редактирования текстовых документов; 5. система подготовки электронных презентаций, предназначена для подготовки и проведения презентаций; 6. менеджер персональной 	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»</p>

информации, предназначен для обеспечения унифицированного доступа к корпоративной информации	
--	--

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

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/9000>

Новиков А.Ф. Строение вещества. Санкт-Петербург, 2013 Режим доступа: <http://books.ifmo.ru/file/pdf/1022.pdf>

б) Дополнительная литература:

Папулов Ю. Г. Строение молекул. Теория и методы расчета [Электронный ресурс] : [для студентов химических направлений и специальностей] / Папулов Юрий Григорьевич; ФГБОУ ВПО "Твер. гос. ун-т". - Тверь : Тверской государственный университет, 2013. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см. - 100.00. Экз.: 2, из них: Фил3-2; Режим доступа: http://texts.lib.tversu.ru/texts/stroenie_molekul_teoriya_i_metody_rascheta_2013/Start.html

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

Google Chrome – бесплатное ПО.

Яндекс Браузер – бесплатное ПО.

Kaspersky Endpoint Security 10 – УПД № ПК 657 от 29.12.2023.

Многофункциональный редактор ONLYOFFICE – бесплатное ПО.

ОС Linux Ubuntu – бесплатное ПО.

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

ЭБС Лань <https://e.lanbook.com/>

ЭБС Znanium.com <https://znanium.com/>

ЭБС Университетская библиотека online <https://biblioclub.ru>

ЭБС ЮРАЙТ <https://urait.ru/>

ЭБС IPR SMART <https://www.iprookshop.ru/>

ЭБС ТвГУ: <http://megapro.tversu.ru/megapro/Web>

Репозиторий ТвГУ: <http://eprints.tversu.ru>

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Учебная программа

1. ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

Основные положения теории химического строения.

Химическая топология. Координация атомов.

Хиральность. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация. Конформация.

Пространственная изомерия.

Внутримолекулярные взаимодействия. Связь свойств веществ и строением молекул.

2. 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.

3. ГЕОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛ

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

4. КОНФОРМАЦИИ МОЛЕКУЛ

Конформации алканов: этана, пропана, н-бутана и т.д. Вид и число конформеров, их симметрия, статистических вес, энергетические и энтропийные различия, конформационная свободная энергия, содержание конформеров в поворотной изомерной смеси

Конформации моноциклов. Малые циклы (3-4 звена), обычные (5-7 звеньев), средние (8-11 звеньев), большие (\square 12 звеньев). Иверсия циклов. Псевдовращение. Конформации циклогексана. Бициклические и поли-циклические соединения.

Планы и методические указания по подготовке к практическим (семинарским) занятиям

Планы практических занятий и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Симметрия молекул и кристаллов» и предназначены для проведения практических занятий и для самостоятельной подготовки аспирантов.

Практические занятия по дисциплине «Симметрия молекул и кристаллов» являются одной из важнейших форм обучения 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.

1. Химическое и стереохимическое строение

Сtereoхимическая конфигурация и конформация. Основные типы изомерии.

2. Симметрия молекул.

Определение точечных групп симметрии (на моделях).

3. Геометрия молекул

Внутреннее вращение. Кривые внутреннего вращение (основные типы), их построение.

5. Конформации молекул

Определение конформаций алканов.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа по дисциплине «Симметрия молекул и кристаллов» 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 аспиранту 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. Теория химического строения
 - 1.1. Химическая топология. Координация атомов.
 - 1.2. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация.
 - 1.3. Связь свойств веществ и строением молекул
2. Симметрия молекулярных систем
 - 2.1. Элементы теории групп.
 - 2.2. Представления групп и характеры.
 - 2.3. Симметрия АО и МО.
3. Геометрия молекул
 - 3.1. Закономерности в геометрической конфигурации.
 - 3.2. Интерпретация геометрического строения на основе теории МО ЛКАО.
4. Конформации молекул
 - 4.1. Конформеры ациклических соединений (алканов).
 - 4.2. Конформации моноциклов (циклопропан, циклопентан, циклопентан).
 - 4.3. Конформации циклогексана.

Примерная тематика контрольных работ (рефератов)

Представленный реферат должен иметь титульный лист, план (содержание, оглавление), изложение (в соответствии с планом), заключение (выводы), список использованной литературы. На титульном листе указывается университет, факультет и кафедра, тема реферата и название дисциплины; учёное звание, фамилия, имя и отчество преподавателя; фамилия, имя и отчество аспиранта. Объём реферата – 12-18 страниц.

1. Химическая топология
2. Топологические индексы
3. Химическое строение и биологическая активность.
4. Строение молекул и лекарственное действие.
5. Теория химического строения
6. Творческие портреты выдающихся учёных. (А.М. Бутлеров)
7. Творческие портреты выдающихся учёных. (Э. Франкланд)
8. Творческие портреты выдающихся учёных. (А. Кекуле)
9. Творческие портреты выдающихся учёных. (Ф. Вёлер)
10. Физические основы учения о строении молекул
11. Симметрия как общий вопрос естествознания
12. Симметрия молекул.
13. Симметрия и асимметрия в живой природе.
14. Геометрия молекул
15. Пространственная изомерия
16. Энтальпия образования и химическое строение.
17. Энтальпия атомизации и средние энергии связей.
18. Электрические свойства
19. Магнитные свойства.
20. Уровни энергии и переходы между ними.
21. Молекулярные спектры
22. Структурные методы и оптическая спектроскопия.
23. Творческие портреты выдающихся учёных. (Н. Бор)
24. Творческие портреты выдающихся учёных. (Л. де Бройль)

25. Творческие портреты выдающихся учёных. (В. Гейзенберг)
26. Творческие портреты выдающихся учёных. (Э. Шредингер)
27. Творческие портреты выдающихся учёных. (П.А. Дирак)
28. Творческие портреты выдающихся учёных. (Р. Оппенгеймер)
29. Межмолекулярное взаимодействие
30. Симметрия кристаллов.
31. Молекула как система материальных точек.
32. Становление квантовой механики
33. Квантовая механика простых систем
34. Внутримолекулярные взаимодействия
35. Внутреннее вращение молекул
36. Развитие стереохимии
37. Пространственное строение полипептидов и белков
38. Стереизомерия аминокислот

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям, контрольным работам 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;

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.

Пример построения варианта контрольного задания

Задание 1

Хиральность – это:

- а) свойство объекта не совмещаться со своим зеркальным изображением;
- б) нарушение симметрии;
- в) свойство объекта быть тождественным своему зеркальному изображению;
- г) асимметрия

Задание 2

Для графа построить матрицу A и найти индексы r_3 и M_1 .

Задание 3

Изобразите изомеры октана (18)

Задание 4

Определите точечную группу симметрии данных молекул. Какие из них являются хиральными? К какой группе симметрии (высшей, средней или низшей) они относятся?

Банк контрольных вопросов и заданий по учебной дисциплине

1. Формирование представлений о строении молекул: атомно-молекулярное учение, химическая теория строения, физическая (квантовомеханическая) теория молекул.
2. Основные черты современного учения о строении молекул: предмет учения, основные теории, строение молекул и свойства, экспериментальные и расчётные методы.
3. Источники научных сведений о строении молекул.

4. Топологические (теоретико-графовые) представления в классической теории химического строения.
5. Аддитивные методы расчёта в химии .
6. Формирование представлений о строении молекул: атомно-молекулярное учение, химическая теория строения, физическая (квантовомеханическая) теория молекул.
7. Основные черты современного учения о строении молекул: предмет учения, основные теории, строение молекул и свойства, экспериментальные и расчётные методы.
8. Источники научных сведений о строении молекул.
9. Классическая теория валентности.
10. Топологические (теоретико-графовые) представления в классической теории химического строения.
11. Аддитивные методы расчёта в химии .
12. Математический формализм квантовой механики (линейные самосопряжённые операторы в гильбертовом пространстве).
13. Основные постулаты квантовой механики.
14. Угловые моменты. Векторная модель.
15. Гармонический осциллятор и жёсткий ротатор (постановка задачи, результаты решения).
16. Задача об атоме водорода (постановка задачи, результаты решения).
17. Принцип построения периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева (формирование электронных оболочек, природа периодичности, смысл деления групп на подгруппы).
18. Периодическая система изотопов (атомных ядер).
19. Одноэлектронное приближение. Теория ССП Хартри-Фока и Рутаана.
20. Вычислительные методы квантовой химии.
21. Хиральность в химии .
22. Инверсионно-перестановочные группы (группы молекулярной симметрии).

23. Закономерности в потенциальных барьерах внутреннего вращения .
24. Конформации открытых цепей (алканов).
25. Конформации моноциклов.
26. Конформации би- и полициклических соединений.
27. Силы межмолекулярного взаимодействия.
28. Аморфные вещества.
29. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
30. Симметрия кристаллов.
31. Типы кристаллов.

Вопросы для подготовки к зачету

1. Химическое строение. Структурная изомерия.
 2. Симметрия молекул (точечные группы).
 3. Хиральность.
 4. Стереохимическое строение. Конфигурация и конформация.
 5. Координация атомов около центрального атома (иона). Геометрия молекул вида AX_n (n = 2, 3, 4,... 9). Валентные состояния атомов.
 3. Конфигурационная (оптическая и геометрическая) изомерия.
 4. Конформационная (поворотная) изомерия.
 5. Химическая и стереохимическая топология. Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.
 11. Потенциальная поверхность (кривая) молекулы. Критерий существования химической частицы как единого связного целого.
 11. Основные понятия теории групп и теории представлений групп.
 12. Симметрия атомных, групповых, молекулярных орбиталей.
 1. Межмолекулярное взаимодействие (основные составляющие).
 2. Строение конденсированных фаз. Жидкости и аморфные вещества.
- Мезофазы.
3. Кристаллы.

VII. Материально-техническое обеспечение

Учебная аудитория (с классной доской и мелом, партами и стульями по количеству учащихся), канцелярские принадлежности, лабораторное оборудование.

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.			
2.			