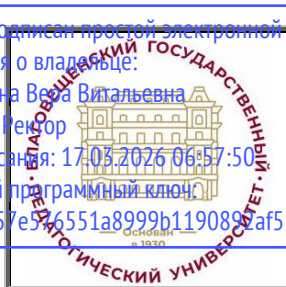
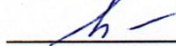


Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Щёкина Вера Витальевна
Должность: Ректор
Дата подписания: 17.05.2023 06:57:50
Уникальный программный ключ:
a2232a55157e526551a8999b1190897af58989420420336ffbf577a434a57789

	МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Благовещенский государственный педагогический университет»
	ОСНОВНАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА Рабочая программа дисциплины

УТВЕРЖДАЮ

**Декан естественно-географического
факультета ФГБОУ ВО «БГПУ»**


И.А. Трофимцова
«17» мая 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины
«СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА С ОСНОВАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ»**

**Направление подготовки
44.03.05 ПЕДАГОГИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ
(с двумя профилями подготовки)**

**Профиль
«БИОЛОГИЯ»**

**Профиль
«ХИМИЯ»**

**Уровень высшего образования
БАКАЛАВРИАТ**

**Принята на заседании кафедры химии
(протокол № 9 от «10» мая 2023 г.)**

Благовещенск 2023

СОДЕРЖАНИЕ

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА	3
2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ	3
3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ)	5
4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ.....	10
5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ	11
6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА.....	15
7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ	22
8 ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ	22
9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ	22
10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА	23
11 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ	25

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

1.1. Цель дисциплины: познакомить студентов с основными понятиями, методами и законами строения вещества и квантовой химии, продемонстрировать возможность их применения в решении проблем современной химии, сформировать у студентов представления о современных квантово-химических расчетах.

1.2 Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Строение вещества с основами квантовой химии» относится к дисциплинам предметного модуля по профилю «Химия» части, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1: Б1.В.02.10.

1.3 Дисциплина направлена на формирование следующих компетенций: ПК-2:

- **ПК-2.** Способен осуществлять педагогическую деятельность по профильным предметам (дисциплинам, модулям) в рамках программ основного общего и среднего общего образования, **индикатором** достижения которой является.

• ПК-2.2 Применяет основы теории фундаментальных и прикладных разделов химии (неорганической, аналитической, органической, физической, химии ВМС, химических основ биологических процессов, химической технологии) для решения теоретических и практических задач.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения. В результате изучения дисциплины студент должен

- **знать:**

- электронное строение атомов и молекул;
- основные законы, явления и процессы, изучаемые строением вещества и квантовой химией;

- **уметь:**

- применять знания об электронном строении молекул для объяснения реакционной способности органических соединений;

- **владеть:**

- математическим аппаратом квантовой химии;
- навыками решения квантовых уравнений.

1.5 Общая трудоемкость дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии» составляет 3 зачетные единицы (далее – ЗЕ) (108 часов).

Программа предусматривает изучение материала на лекциях и лабораторных занятиях. Предусмотрена самостоятельная работа студентов по темам и разделам. Проверка знаний осуществляется фронтально, индивидуально.

1.6 Объем дисциплины и виды учебной деятельности

ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры
Общая трудоемкость	108	10
Аудиторные занятия	64	
Лекции	26	
Лабораторные работы	38	
Самостоятельная работа	44	
Вид итогового контроля		зачет

2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ

Учебно-тематический план (очная форма обучения)

№ п/п	Наименование разделов	Всего часов	Виды уч. занятий		
			ЛК	ЛБ	СР
I	Основы квантовой механики и квантовой химии				
1.	Тема I. Начала квантовой теории. Гипотеза План-	4	2		2

	ка. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора				
2.	Лабораторная работа 1. Введение. Начала квантовой механики.	4		2	2
3.	Тема 2. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Свойства волновой функции.	4	2		2
4.	Лабораторная работа 2. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Свойства волновой функции	6		4	2
5.	Тема 3. Операторы физических величин. Постулаты квантовой механики	6	2		4
6.	Лабораторная работа 3. Операторы физических величин. Постулаты квантовой механики	6		4	2
7.	Тема 4. Одноэлектронные атомы.	6	4		2
8.	Лабораторная работа 4. Одноэлектронные атомы	6		4	2
II	Строение вещества				
9.	Тема 5. Условия возникновения и характеристики химической связи. Ковалентная связь	4	2		2
10.	Лабораторная работа 5. Ковалентная связь.	6		4	2
11.	Тема 6. Ионная, металлическая и водородная связь.	6	4		2
12.	Лабораторная работа 6. Ионная, металлическая и водородная связь	6		4	2
13.	Тема 7. Геометрия молекул. Теория ОЭПВО. Сведения о свойствах симметрии молекул. Структурно-нежесткие молекулы	4	2		2
14.	Лабораторная работа 7. Геометрия молекул. Теория ОЭПВО. Сведения о свойствах симметрии молекул. Структурно-нежесткие молекулы	6		4	2
15.	Тема 8. Средние энергетические характеристики, электрические и магнитные свойства молекул	4	2		2
16.	Лабораторная работа 8. Средние энергетические характеристики молекул. Электрические и магнитные свойства молекул	6		4	2
17.	Тема 9. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул	6	4		2
18.	Лабораторная работа 9. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул	6		4	2
19.	Тема 10. Межмолекулярные взаимодействия. Конденсированное состояние вещества	4	2		2
20.	Лабораторная работа 10. Межмолекулярные взаимодействия. Конденсированное состояние вещества	6		4	2
21.	Контрольная работа	2			2
	Всего	108	26	38	44

Интерактивное обучение по дисциплине

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма интерактивного занятия	Кол-во часов
1.	Начала квантовой теории. Гипотеза Планка. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Теория Н. Бора.	ЛК	Лекция-дискуссия	2

2.	Лабораторная работа 2. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Свойства волновой функции.	ЛР	Работа в малых группах	4
3.	Одноэлектронные атомы.	ЛК	Лекция-консультация	2
4.	Лабораторная работа 5. Ковалентная связь.	ЛР	Работа в малых группах	4
5.	Лабораторная работа 6: Ионная, металлическая и водородная связь	ЛР	Работа в малых группах	4
6	Геометрия молекул. Теория ОЭПВО. Сведения о свойствах симметрии молекул. Структурно-нежесткие молекулы	ЛК	Лекция дискуссия	2
	Всего			18

3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ)

I ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Введение. Основы квантовой механики и квантовой химии. Квантовая теория как основа теоретического фундамента современной химической науки.

Начала квантовой теории. Основные этапы развития квантовой теории. Макромир. Описание в рамках классической механики и электродинамики. Волновая теория электромагнитного излучения. Излучение абсолютно черного тела. Гипотеза Планка. Уравнение, постоянная Планка, ее физический смысл.

Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Экспериментальные подтверждения корпускулярных свойств излучения: фотоэффект и эффект Комптона. Попытка применения гипотезы квантования для создания теории строения атомов (Н. Бор).

Гипотеза де Бройля о двойственной природе материи. Экспериментальные доказательства волновых свойств электрона и других микрочастиц. Волны де Бройля.

Принцип неопределенности Гейзенберга как фундаментальный закон природы. Примеры действия принципа неопределенности. Принцип дополнительности (Н. Бор). Его роль в теории познания.

Постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Операторы. Некоторые свойства операторов. Сложение, умножение операторов, возведение в степень. Коммутатор, антикоммутатор. Собственные функции и собственные значения операторов. Эрмитовы операторы.

Принцип соответствия и операторы физических величин: координат, импульсов, моментов импульсов, кинетической и потенциальной энергии и их свойства. Оператор Лапласа. Оператор Гамильтона. Примеры собственных функций различных операторов.

Основные постулаты квантовой механики.

Общее уравнение волнового движения и его применение Шредингером для описания движения микрочастиц. Функции состояния (волновые функции).

Стационарное уравнение Шредингера. Волновая функция как решение уравнения Шредингера. Интерпретация волновой функции, предложенная М. Борном. Свойства волновой функции. Электронная плотность. Граничная и узловая поверхности. Роль уравнения Шредингера в квантовой механике.

Вероятности результатов измерения физических величин, средние значения.

Частные случаи решения уравнения Шредингера (точно решаемые задачи)

Простейшие примеры применения квантовой механики. Свободное движение частиц. Потенциальный барьер и эффект туннелирования. Квантовая интерференция. Движение частицы в потенциальном ящике (одномерная и трехмерная задачи). Гармонический осциллятор. Одномерный жесткий ротатор. Сферический ротатор. Понятие о квантовых числах и вырожденном состоянии. Закономерности и выводы, следующие из получаемых решений.

Приближенные методы в квантовой механике: вариационный метод и теория возмущений.

II ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Одноэлектронные атомы

Уравнение Шредингера для атома водорода. Гамильтониан в приближении неподвижного ядра. Переход к сферическим координатам. Разделение волновой функции на радиальную и угловую составляющие. Нахождение вида функций радиальной и угловой составляющих.

Система квантовых чисел. Понятие атомной орбитали. Графическое изображение радиальной и угловых частей волновой функции атома водорода. Радиальные функции и радиальные функции распределения атома водорода.

Частные случаи решения уравнения Шредингера. Движение частицы в потенциальном ящике (одномерная и трехмерная задачи). Одномерный жесткий ротатор. Сферический ротатор. Гармонический осциллятор. Понятие о квантовых числах.

Главное квантовое число и энергия атома водорода. Угловой момент и магнитный орбитальный момент атома. Орбитальное и магнитное квантовые числа. Узловая поверхность. Связь числа узловых поверхностей с орбитальным квантовым числом.

Учет движения ядра атома водорода. Разделение движений ядра и электрона. Приведенная масса. Изотопический эффект.

Расчет средних величин. Среднее и наиболее вероятное расстояние электрона от ядра. Среднее расстояние ядро-электрон.

Средние значения потенциальной, кинетической и полной энергий. Теорема вириала. Средняя скорость движения электрона.

Переходы электрона под влиянием электромагнитного излучения. Правила отбора. Влияние внешнего поля: снятие вырождения и расщепление спектральных линий в магнитном и электрическом полях.

Собственный момент количества движения электрона. Спиновое квантовое число. Магнитное спиновое квантовое число. Системы тождественных частиц. Антисимметричность волновой функции для системы электронов.

Многоэлектронные атомы. Гамильтониан многоэлектронного атома.

Уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов.

Невозможность точного решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы. Нулевое приближение. Одноэлектронное приближение. Одноэлектронные волновые функции Хартри. Метод самосогласованного поля.

Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод возмущения. Вариационные методы. Основные пути введения приближений: упрощение аналитического вида пробных волновых функций, приближенное вычисление интегралов, параметризация на основе экспериментальных данных.

Принцип Паули. Определители Слэтера. Усовершенствование метода Хартри Фоком. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Атомные орбитали Слэтера. Эффективные главное квантовое число и заряд. Константа экранирования. Потенциал ионизации. Сродство к электрону.

Факторы, влияющие на энергию атомных орбиталей многоэлектронных атомов. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Принцип построения периодической системы элементов Д.И. Менделеева.

Квантовые числа многоэлектронных атомов. Спин-орбитальное взаимодействие. Термы атомов. Спектры многоэлектронного атома. Правила отбора. Многоэлектронный атом в магнитном и электрическом полях.

III ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение). Потенциальная кривая.

Зарождение и развитие атомистических представлений о структуре вещества. Понятие макротела и микрочастицы. Химические частицы: атомы, молекулы, атомные и молекулярные ионы, свободные радикалы, комплексы. Макротела как большие совокупности химических частиц.

Теоретические основы учения о строении и свойствах макротел. Общая характеристика термодинамического и статистического подходов к описанию строения и свойств газообразных, жидких и твердых макротел, взаимоотношение этих теорий.

Теоретические основы учения о строении химических частиц. Классическая теория химического строения (А.М. Бутлеров, Э. Франкланд, А. Кекуле, А.С. Купер, А. Вернер) и квантовая механика (Э. Шредингер, В. Гейзенберг, Г. Паули, Э. Ферми, П.А.М. Дирак) в приложении к описанию строения и свойств химических частиц; взаимоотношение этих теорий.

Модель молекулы как единой динамической системы из ядер и электронов. Поступательное движение и вращение молекул как целого; внутримолекулярное движение ядер.

IV СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Типы химической связи. Ковалентная химическая связь как универсальный тип связи. Свойства ковалентной связи. Валентность эффективных атомов в молекуле, проблема валентного состояния. σ -, π -, δ -связи. Кластеры. Донорно-акцепторное и дативное взаимодействия. π -Комплексы. Локализованные и делокализованные связи. Электронодефицитные и электроноизбыточные молекулы. Описание ковалентной связи в рамках методов ВС и МО.

Ионная связь. Область применимости ионной модели. Уравнение Борна для ионных молекул. Ненаправленность и ненасыщаемость ионной связи. Координационные числа и структурные типы ионных кристаллических решеток. Роль соотношений ионных радиусов. Уравнение Борна для ионной кристаллической решетки. Константы Маделунга. Цикл Борна-Габер. Поляризация ионов и ее влияние на характер ионной связи. Поляризуемость и поляризующая способность ионов. Правила Фаянса.

Металлы и их характерные свойства. Теория “электронного газа”, ее недостатки. Применение метода молекулярных орбиталей для объяснения связей в металлах. Зонная теория металлической связи. График зависимости числа разрешенных энергетических состояний от энергии. Валентная зона, запрещенная зона, зона проводимости. Проводники, полупроводники, диэлектрики.

Водородная связь. Энергия водородной связи. Типы водородной связи. Примеры. Влияние водородной связи на физико-химические свойства веществ. Гидраты и клатраты. Объяснение природы водородной связи.

V ГЕОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛ

1. *Параметры, определяющие геометрию молекулы*

Понятие равновесной геометрической конфигурации молекулы, различные способы ее описания. Параметры, определяющие геометрию молекулы: межъядерные расстояния, валентные углы, углы внутреннего вращения.

Закономерности в равновесных значениях межъядерных расстояний связанных атомов. Зависимость длин связей от ближайшего окружения.

Закономерности в равновесных значениях двугранных углов и углов внутреннего вращения. Понятие конформации молекулы.

Закономерности в равновесных значениях валентных углов. Интерпретация направленности химических связей (методы ВС и МО). Гибридизация атомных орбиталей и пространственная направленность химических связей. Недостатки концепции гибридизации как средства описания геометрической структуры молекулы.

2. *Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей (ОЭПВО)*

Правила Гиллеспи. Отклонения от предсказаний теории ОЭПВО. Качественная теория молекулярных орбиталей.

3. *Сведения о свойствах симметрии молекул.*

Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления, характеры представлений. Применение теории групп в химии.

4. Установление геометрии молекул.

Дифракционные методы. Дифракция рентгеновских лучей. Рентгеновская кристаллография. Рентгеноструктурный анализ. Возможности и ограничения методов. Дифракция нейтронов. Достоинства и недостатки метода. Дифракция электронов. Электронографический метод. Спектроскопические методы. Их классификация. Области применения.

4. Структурно нежесткие молекулы

Потенциальные функции нежестких молекул. Явления внутреннего вращения, политопии, таутомерии молекул. Потенциальные барьеры. Динамическая изомерия молекул. Электронная природа структурной нежесткости молекул. Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул. Физические методы исследования нежестких молекул. Электронная природа структурной нежесткости молекул.

VI СРЕДНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОЛЕКУЛ

Энергия образования из простых веществ и свободных атомов. Энергия образования как сумма эффективных парциальных энергий, сопоставляемых отдельным связям молекул. Представление энтальпии образования молекулы как суммы величин, сопоставляемых отдельным связям.

VII. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ

1. Электрический дипольный момент

Электрический дипольный момент. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекулы. Дипольный момент и изомерия молекул. Экспериментальные методы измерения дипольных моментов. Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов.

2. Поляризуемость

Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный момент и поляризуемость молекулы. Анизотропия поляризуемости, средняя поляризуемость. Эллипсоид поляризуемости. Эллипсоид поляризуемости и симметрия молекул.

3. Молекулы во внешнем электрическом поле

Связь молекулярных постоянных - дипольного момента и поляризуемости - с макроскопическими характеристиками веществ (диэлектрической проницаемостью и показателем преломления). Поляризации диэлектрика в статическом поле и поле определенной частоты. Уравнение Ланжевена-Дебая. Уравнение Клаузиса-Моссотти. Молярная рефракция.

VIII МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ

Магнитные свойства ядер и электронов. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекулы в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Магнитная поляризация. Связь макроскопической характеристики вещества - магнитной проницаемости - с магнитными свойствами молекул.

IX ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии молекулы.

Электронные состояния. Потенциальные функции двухатомных молекул и потенциальные поверхности многоатомных молекул. Классификация электронных состояний двухатомных молекул по проекции орбитального момента и спина электронов. Свойства симметрии электронных волновых функций двухатомных молекул. Классификация электронных состояний и электронных волновых функций многоатомных молекул. Различия свойств молекул в различных электронных состояниях.

Колебательные состояния. Колебание двухатомной молекулы согласно классической теории в приближении гармонического осциллятора. Колебательные состояния двухатомной молекулы в приближениях гармонического и ангармонического осцилляторов. Классическая теория малых колебаний многоатомных молекул. Кинетическая и потенциальная энергия, нормальные координаты, нормальные колебания. Характеристичность колебаний, групповые колебания. Колебательные состояния многоатомных молекул согласно квантовой механике.

Вращательные состояния. Вращение двухатомной молекулы согласно классической теории в приближении жесткого ротатора. Вращательные состояния двухатомной молекулы согласно квантовой механике в приближениях жесткого и нежесткого колеблющегося ротатора. Классическая теория вращения многоатомных молекул. Момент количества движения и кинетическая энергия вращения. Классификация многоатомных молекул по симметрии эллипсоида инерции. Квантово-механическая теория вращательных состояний многоатомных молекул. Линейные молекулы, молекулы типов сферического, симметричного и асимметричного волчков. Системы вращательных уровней энергии.

Вращательные, колебательные и электронные спектры молекул. Дипольный момент и поляризуемость молекул в различных электронно-колебательно-вращательных состояниях. Правила отбора для спектров испускания, поглощения и комбинационного рассеяния. Структура спектров. Получение экспериментальных значений энергии диссоциации двухатомной молекулы, геометрических параметров и другой структурной информации о молекулах из электронных, колебательных и вращательных спектров.

X МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Экспериментальные доказательства существования межмолекулярных взаимодействий. Ван-дер-ваальсовы силы. Общность физической природы внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Приближенное описание межмолекулярных взаимодействий как суммы ориентационных (эффект Кезома), индукционных (эффект Дебая) и дисперсионных (эффект Лондона) взаимодействий. Межмолекулярное отталкивание. Уравнение Леннарда-Джонса. Проявление межмолекулярных взаимодействий в свойствах веществ. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Ионно-молекулярное взаимодействие.

XI КОНДЕНСИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ

Строение твердых тел. Классификация твердых тел. Кристаллическое состояние. Дальний порядок. Типы кристаллических решеток в зависимости от природы связи (ковалентная, ионная, металлическая, межмолекулярное взаимодействие). Свойства веществ с различными типами кристаллических решеток.

Дефекты в кристаллах. Атомные дефекты. Примесные дефекты. Нестехиометричность. Линейные и плоские дефекты.

Методы исследования твердых тел. Микроскопические методы исследования. Дифракционные методы исследования. Методы определения элементного состава. Методы исследования ближнего окружения и окислительного состояния атома. Термоаналитические методы.

Строение жидкостей. Ближний порядок. Функции распределения частиц. Теории строения жидкостей.

Аморфные вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жидков, В. В. Основы квантовой химии и строение вещества : учебно-методическое пособие для студентов педвузов / В. В. Жидков, И. В. Егорова. – Благовещенск : Издательство БГПУ, 2024. – 305 с.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. вузов / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 382 с. (14 экз.)
3. Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с. (30 экз.)

4. Корольков Д.В. Основы теоретической химии. / Д.В. Корольков, Г.А. Скоробогатов. – М.: Издательский центр «Академия», 2007. – 352 с. (47 экз.)
5. Кнотько А.В. Химия твердого тела : учеб. пособие для студ., обучающихся по спец. «Химия» / А. В. Кнотько, И. А. Пресняков, Ю. Д. Третьяков. - М. : Академия, 2006. - 301, [1] с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). (19 экз.)
6. Неорганическая химия. В 3 т. : учебник для студ. вузов / под ред. Ю. Д. Третьякова. - М. : Академия, 2007. Т. 1 : Физико-химические основы неорганической химии. - 233, [1] с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). (20 экз.)
7. Физическая химия. В 2 кн. / К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев и др.; под ред. К. С. Краснова. – М.: Высшая школа, 2001. – Кн. 1.: Строение вещества. Термодинамика. – 3-е изд., испр. – 511 с. (23 экз.)

4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа призвана помочь студентам, обучающимся по направлению «44.03.05-Педагогическое образование», в организации самостоятельной работы по освоению дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии».

Дисциплина «Строение вещества с основами квантовой химии» изучается в 10 семестре. Она представляет собой начальное введение в основной раздел современной теоретической химии, без знания которого работать учителем химии невозможно, как невозможно в настоящее время работать в естественных науках без знания математики.

Предлагаемая учебная программа опирается на цикл дисциплин, изучаемых на 1-2 курсах, таких как «Общая и неорганическая химия», «Физическая и коллоидная химия».

Целью дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии» является последовательное изложение нерелятивистской квантовой теории на основе небольшого числа постулатов. При этом отобран минимальный объем сведений, необходимый для правильного понимания современной квантовой химии. Дисциплина предполагает знание студентами классической механики и классической электродинамики. Квантовая химия оперирует детальной информацией о строении вещества, что позволяет ей объяснить и предсказать многие свойства химических соединений, в том числе такие, которые неподвластны классической теории, например свойства возбужденных состояний.

Строение и свойства химических соединений, их взаимодействия и превращения рассматриваются на основе представлений квантовой механики и экспериментально установленных закономерностей, в том числе описываемых классической теорией химического строения. Одно из наиболее важных её направлений – изучение элементарных актов химических превращений, выделяемых в последние годы отдельно как химическая динамика. Квантовая химия использует математический аппарат и методы квантовой механики для описания и расчета свойств химических соединений, начиная с атомов и простейших молекул и кончая такими высокомолекулярными соединениями, как, белки, и конденсированными средами, в которых уже невозможно рассматривать отдельные низкомолекулярные фрагменты.

Данная учебная дисциплина имеет следующие задачи:

- Изучение основных постулатов и математического аппарата квантовой механики;
- Изучение приближенных методов решения квантово-механических задач;
- Изучение основных положений строения вещества и квантовой химии;
- Освоение неэмпирических и полуэмпирических методов изучения электронного строения атомов и молекул, качественной теории реакционной способности.

Рабочей программой дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии» предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 54 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;

- решение задач;
- подготовку к практическим занятиям;
- работу с Интернет-источниками;
- подготовку к выполнению тестовых заданий и сдаче экзамена.

Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины «Строение вещества с основами квантовой химии». Для успешного усвоения каждого из вопросов для самостоятельного изучения, приведенных в таблице, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этом вопросе и для освоения последующих разделов дисциплины.

В процессе проведения лабораторного практикума студенты должны закрепить и углубить знания, полученные в лекционном курсе, приобрести практические навыки в решении задач по квантовой механике и квантовой химии, ознакомиться с современными методами анализа строения атома и молекул.

К каждой теме программы даны учебно-методические материалы лекционного курса, включающие план лекции по каждой изучаемой теме и особенности изучаемого материала, приводится список основной и дополнительной литературы.

Представлены задания для самостоятельного изучения дисциплины, вариант контрольной работы, итоговые контрольные тесты, которые позволяют проверить уровень усвоения изученного материала. Контрольные тесты содержат задания разного содержания и уровня сложности, что позволяет достоверно оценить полноту знаний студентов.

Прежде чем приступить к выполнению заданий для самоконтроля, студентам необходимо изучить рекомендуемую по каждой теме литературу. Общий список учебной и учебно-методической литературы представлен в отдельном разделе данной программы. Кроме того, в материалах по подготовке лабораторных занятий и заданий для самостоятельной работы, а также при подготовке к экзамену по каждой теме указана основная и дополнительная литература.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине

№	Наименование раздела (темы)	Формы/виды самостоятельной работы	Количество часов, в соответствии с учебно-тематическим планом
I	Введение. Начала и постулаты квантовой механики. Основы квантовой химии	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Подготовка отчета по лабораторной работе	18
II	Строение вещества. Теория химической связи.	Изучение основной литературы Изучение дополнительной литературы Подготовка отчета по лабораторной работе Подготовка к контрольной работе	28
Всего			44

5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

План лабораторных работ

№	Тема лабораторной работы, практического занятия	Практикум
1	Лабораторная работа 1. Введение. Начала квантовой механики	[1] стр. 5
2	Лабораторная работа 2. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Свойства волновой функции.	[1] стр. 5
3	Лабораторная работа 3. Операторы физических величин. Постулаты	[1] стр. 48

	квантовой механики.	
4	Лабораторная работа 4. Одноэлектронные атомы..	[1] стр. 88
5	Лабораторная работа 5. Ковалентная связь.....	[2] стр. 96
6	Лабораторная работа 6. Ионная, металлическая и водородная связь.	[2] стр. 99
7	Лабораторная работа 7. Геометрия молекул. Теория ОЭПВО. Сведения о свойствах симметрии молекул. Структурно-нежесткие молекулы	[2] стр. 144
8	Лабораторная работа 8. Средние энергетические характеристики молекул. Электрические и магнитные свойства молекул.	[2] стр. 225
9	Лабораторная работа 9. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул	[2] стр. 234
10	Лабораторная работа 10. Межмолекулярные взаимодействия. Конденсированное состояние вещества	[2] стр. 276

[1] Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с.

[2] Егорова, И.В. Строение вещества : учебно-методическое пособие для студентов педвузов / И. В. Егорова. – Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2023. – 249 с.

ЛИТЕРАТУРА

1. Жидков, В. В. Основы квантовой химии и строение вещества : учебно-методическое пособие для студентов педвузов / В. В. Жидков, И. В. Егорова. – Благовещенск : Издательство БГПУ, 2024. – 305 с.

2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. вузов / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 382 с. (14 экз.)

3. Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с. (30 экз.)

4. Корольков Д.В. Основы теоретической химии. / Д.В. Корольков, Г.А. Скоробогатов. – М.: Издательский центр «Академия», 2007. – 352 с. (47 экз.)

5. Кнотько А.В. Химия твердого тела : учеб. пособие для студ., обучающихся по спец. «Химия» / А. В. Кнотько, И. А. Пресняков, Ю. Д. Третьяков. - М. : Академия, 2006. - 301, [1] с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). (19 экз.)

6. Неорганическая химия. В 3 т. : учебник для студ. вузов / под ред. Ю. Д. Третьякова. - М. : Академия, 2007. Т. 1 : Физико-химические основы неорганической химии. - 233, [1] с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). (20 экз.)

7. Физическая химия. В 2 кн. / К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев и др.; под ред. К. С. Краснова. – М.: Высшая школа, 2001. – Кн. 1.: Строение вещества. Термодинамика. – 3-е изд., испр. – 511 с. (23 экз.)

Вопросы к лабораторным работам

Лабораторная работа 1: Начала квантовой теории. Гипотеза Планка.

1.1. Введение. Описание макромира в рамках классической физики (механики и электродинамики).

1.2. Излучение. Абсолютно черное тело. Уравнение Планка. Постоянная Планка и ее физический смысл.

1.3. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Фотоны.

1.4. Экспериментальные подтверждения корпускулярных свойств излучения и волновых свойств электронов. Фотоэффект и эффект Комптона.

1.5. Спектр атома водорода. Уравнения Бальмера и Ридберга. Теория строения атома Н. Бора.

1.6. Гипотеза и уравнение Луи де Бройля. Принципы дополнительности Н. Бора и неопределенности В. Гейзенберга.

Лабораторная работа 2. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Свойства волновой функции

Вопросы к лабораторной работе 2:

- 2.1. Уравнение Шредингера.
- 2.2. Волновая функция. Свойства волновой функции.

Лабораторная работа 3. Операторы физических величин. Постулаты квантовой механики

Вопросы к лабораторной работе 3:

- 3.1. Операторы и их свойства.
- 3.2. Операторы физических величин.
- 3.3. Постулаты квантовой механики.

Лабораторная работа 4. Одноэлектронные атомы

Вопросы к лабораторной работе 4:

4.1. Уравнение Шредингера для атома водорода. Переход к сферическим координатам.

4.2. Разделение переменных и нахождение вида волновых функций.

4.3. Система квантовых чисел.

4.4. Атомная орбиталь. Графическое изображение радиальной и угловой частей волновой функции.

4.5. Расчет средних величин.

4.6. Спектры водородоподобных атомов. Правила отбора.

Лабораторная работа 5. Ковалентная связь

Вопросы к лабораторной работе 5:

5.1. Условия возникновения и характеристики химической связи.

Химическая связь. Энергия химической связи. Равновесная длина связи в молекуле. Прочность, средняя энтальпия связи. Электроотрицательность и энтальпия связи.

5.2. Ковалентная связь в методе валентных связей.

Метод валентных связей (МВС). Донорно-акцепторное взаимодействие. Гомоядерные двухатомные молекулы. Многоядерные молекулы. Возбуждение. Гибридизация.

5.3. Ковалентная связь в методе молекулярных орбиталей.

Приближения, на которых основана теория ММО. Модель линейной комбинацией атомных орбиталей (ЛКАО). Связывающие и разрыхляющие орбитали.

5.4. Гомоядерные двухатомные молекулы в ММО. Фотоэлектронные спектры.

5.5. Гетероядерные двухатомные молекулы. Моноксиды углерода и азота. Молекула HF. Порядок связи.

5.6. Описание многоатомных молекул. Сопоставление энергетических диаграмм орбиталей молекул разного строения

Молекулярные орбитали многоатомных молекул. Трехатомные линейные молекулы. Молекула BeH_2 . Молекула CO_2 . Пятиатомные тетраэдрические молекулы. Сопоставление энергетических диаграмм орбиталей молекул разного строения.

Лабораторная работа 6. Ионная, металлическая и водородная связь

Вопросы к лабораторной работе 6:

6.1. Ионная связь. Ионные соединения. Основные структурные типы ионных соединений. Закономерности в строении ионных кристаллов.

Электроотрицательность. Степень ионности связи. Ионные соединения.

Основные структурные типы ионных соединений. Структура каменной соли. Структура хлорида цезия. Закономерности в строении ионных кристаллов. Ионные радиусы.

6.2. Структура простых твердых тел. Энергия ионной связи.

Энтальпия кристаллической решетки. Вклад электростатического взаимодействия в энтальпию кристаллической решетки. Отталкивание, возникающее при перекрытии электронных оболочек. Уравнение Борна-Майера. Уравнение Капустинского.

6.3. Металлическая связь. Металлические кристаллы. Кристаллическая структура металлов.

Металлы и их свойства. Первые модели описания металлической связи. Металлическая связь. Кристаллическая структура металлов.

Описание металлической связи с позиций метода молекулярных орбиталей. Проводники, диэлектрики, полупроводники.

6.4. Водородная связь. Определение и основные понятия.

Водородная связь. Определение и основные понятия. Энергия водородной связи.

Классификация водородных связей.

6.5. Природа водородной связи. Влияние внутримолекулярной водородной связи на реакционную способность веществ.

Водородная связь как электростатическое взаимодействие молекул ХАН и ВУ. Водородная связь как донорно-акцепторное взаимодействие молекул ХАН и ВУ.

Влияние водородной связи на свойства веществ.

Влияние внутримолекулярной водородной связи на реакционную способность веществ.

Лабораторная работа 7. Геометрия молекул. Теория ОЭПВО. Сведения о свойствах симметрии молекул. Структурно-нежесткие молекулы

Вопросы к лабораторной работе 7:

7.1. Расположение электронных пар на валентных оболочках.

Теория отталкивания валентных электронных пар (ОЭВП).

Конфигурация молекул.

Искажение кристаллической решетки. Эффект Яна-Теллера.

7.2. Формы молекул.

Факторы, влияющие на силы отталкивания электронных пар.

Геометрические особенности молекул PF_5 , CH_3PF_4 , $(CH_3)_2PF_3$ и $(CH_3)_3PF_2$.

7.3. Введение в теорию симметрии. Симметрия молекул с точки зрения теории групп.

Симметрия молекул с точки зрения теории групп.

Операции симметрии и элементы симметрии.

Элемент симметрии. Единичная операция. Операция инверсии. Элемент симметрии – точка.

7.4. Точечные группы симметрии молекул.

Распределение молекул по точечным группам симметрии.

Полярные молекулы. Хиральные молекулы.

7.5. Нежесткие молекулы.

Нежесткие молекулы. Потенциальные функции нежестких молекул.

Жесткие молекулы. Структурно-нежесткие молекулы. Локально-нежесткие молекулы. Глобально-нежесткие молекулы.

Симметрия структурно-нежестких молекул. Электронно-нежесткие молекулы.

7.6. Основные типы структурно-нежестких молекул. Внутреннее вращение. Конформации.

Политопные перегруппировки: инверсия пирамидальных молекул, псевдовращение Берри, плоская инверсия дикоординированных структур, инверсия октаэдрических и тетраэдрических структур.

Таутомерные перегруппировки.

Лабораторная работа 8. Средние энергетические характеристики молекул. Электрические и магнитные свойства молекул

Вопросы к лабораторной работе 8:

8.1. Энергия образования молекул из простых веществ и свободных атомов.

Энергия образования как сумма эффективных парциальных энергий, сопоставляемых отдельным связям молекулы.

8.2. Энтальпии образования молекулы как суммы величин, сопоставляемых отдельным связям.

8.3. Электрический дипольный момент. Поляризуемость молекулы.

Постоянный дипольный момент. Поляризуемость. Поляризуемость молекулы.

8.4. Магнитные свойства молекул. Постоянный магнитный момент. Молекулы во внешнем электрическом поле.

Поляризация. Постоянный магнитный момент. Молекулы во внешнем электрическом поле. Индуцированные магнитные моменты.

Состояние молекулы в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Магнитная поляризация.

8.5. Поляризуемость при высоких частотах. Показатель преломления.

Показатель преломления

8.6. Поляризуемость и оптическая активность. Аддитивные свойства.

Аддитивные свойства.

Лабораторная работа 9. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул

Вопросы к лабораторной работе 9:

9.1. Полная энергия молекулы.

9.2. Энергия многоатомной молекулы. Молекулярный терм.

Дефект колебательного кванта. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул.

ИК-спектроскопия и ее использование в химии.

Лабораторная работа 10. Межмолекулярные взаимодействия. Конденсированное состояние вещества.

Вопросы к лабораторной работе 10:

10.1. Межмолекулярные силы.

Диполь-дипольное взаимодействие. Взаимодействие диполь-индуцированный диполь. Взаимодействие индуцированный диполь-индуцированный диполь. Отталкивание и суммарное взаимодействие. Роль межмолекулярных сил.

Ионные решетки.

Структура жидкостей.

10.2. Агрегатные состояния вещества.

Элементарная ячейка. Ближний порядок. Изотропность. Аморфное состояние. Аллотропическая модификация.

10.3. Типы химической связи в твердом теле.

Ионные кристаллы. Пространственное строение ионных кристаллов. Металлические кристаллы. Кристаллическая структура металлов.

10.4. Ковалентные кристаллы. Строение ковалентных кристаллов.

Энергетические зоны в алмазоподобных кристаллах. Зонная теория твердого тела.

10.5. Полупроводниковые кристаллы.

Внутренний фотоэффект.

10.6. Молекулярные и жидкие кристаллы.

Строение молекулярных кристаллов.

Жидкие кристаллы.

Кристаллы со смешанным типом связи.

6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА

6.1 Оценочные средства, показатели и критерии оценивания компетенций

Индекс компетенции	Оценочное средство	Показатели оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций
---------------------------	---------------------------	------------------------------	---

ПК-2	Отчет по лабораторной работе, устный ответ на лабораторном занятии	Низкий – неудовлетворительно	ставится, если допущены существенные ошибки (в ходе эксперимента, в объяснении, в оформлении работы, по технике безопасности, в работе с веществами и приборами), которые не исправляются даже по указанию преподавателя.
		Пороговый – удовлетворительно	ставится, если допущены одна-две существенные ошибки (в ходе эксперимента, в объяснении, в оформлении работы, по технике безопасности, в работе с веществами и приборами), которые исправляются с помощью преподавателя.
		Базовый – хорошо	а) работа выполнена правильно, без существенных ошибок, сделаны выводы; б) допустимы: неполнота проведения или оформления эксперимента, одна-две несущественные ошибки в проведении или оформлении эксперимента, в правилах работы с веществами и приборами
		Высокий – отлично	а) работа выполнена полно, правильно, без существенных ошибок, сделаны выводы; б) эксперимент осуществлен по плану с учетом техники безопасности и правил работы с веществами и приборами; в) имеются организационные навыки (поддерживается чистота рабочего места и порядок на столе, экономно используются реактивы).
	Контрольная работа, зачет	Низкий – неудовлетворительно	допустил число ошибок и недочетов превосходящее норму, при которой может быть выставлена оценка «3»
		Пороговый – удовлетворительно	если студент правильно выполнил не менее половины работы или допустил: не более двух грубых ошибок; или не более одной грубой и одной негрубой ошибки и одного недочета; или не более двух-трех негрубых ошибок; или одной негрубой ошибки и трех недочетов; или при отсутствии ошибок, но при наличии четырех-пяти недочетов.
		Базовый – хорошо	студент выполнил работу полностью, но допустил в ней: не более одной негрубой ошибки и одного недочета или не более двух недочетов
		Высокий – отлично	работа выполнена без ошибок, указаны все расчетные формулы, единицы измерения, без ошибок выполнены математические расчеты
ПК-2	Тест	Низкий – до 60 баллов (неудовлетворительно)	За верно выполненное задание тестируемый получает максимальное количество баллов, предусмотренное для этого задания, за неверно выполненное – ноль баллов. После прохождения теста суммируются результаты выполнения всех заданий. Подсчитывается процент правильно выпол-
		Пороговый – 61-75 баллов (удовлетворительно)	

	Базовый – 76-84 баллов (хорошо)	ненных заданий теста, после чего этот процент переводится в оценку, руководствуясь указанными критериями оценивания.
	Высокий – 85-100 баллов (отлично)	

6.2 Промежуточная аттестация студентов по дисциплине

Промежуточная аттестация является проверкой всех знаний, навыков и умений студентов, приобретённых в процессе изучения дисциплины. Формой промежуточной аттестации по дисциплине является зачёт.

Для оценивания результатов освоения дисциплины применяются следующие критерии оценивания.

Общая классификация ошибок

При оценке знаний, умений, навыков следует учитывать все ошибки (грубые и негрубые) недочёты.

Грубыми считаются ошибки:

- незнание определения основных понятий, законов, правил, основных положений, теории, незнание формул, общепринятых символов обозначений величин, единиц их измерения, наименований этих единиц;
- неумение выделить в ответе главное; обобщить результаты изучения;
- неумение применить знания для решения задач, объяснения явления;
- неумение читать и строить графики, принципиальные схемы;
- неумение подготовить установку или лабораторное оборудование, провести опыт, наблюдение, сделать необходимые расчёты или использовать полученные данные для выводов;
- неумение пользоваться первоисточниками, учебником, справочником;
- нарушение техники безопасности, небрежное отношение к оборудованию, приборам, материалам.

К негрубым ошибкам относятся:

- неточность формулировок, определений, понятий, законов, теорий, вызванная неполнотой охвата основных признаков определяемого понятия или заменой 1 - 3 из этих признаков второстепенными;
- ошибки при снятии показаний с измерительных приборов, не связанные с определением цены деления шкалы;
- ошибки, вызванные несоблюдением условий проведения опыта, наблюдения, условий работы прибора, оборудования;
- ошибки в условных обозначениях на схемах, неточность графика;
- нерациональный метод решения задачи, выполнения части практической работы, недостаточно продуманный план устного ответа (нарушение логики изложения, подмена отдельных основных вопросов второстепенными);
- нерациональные методы работы со справочной литературой;
- неумение решать задачи, выполнять задания в общем виде.

Недочётами являются:

- нерациональные приёмы вычислений и преобразований, выполнения опытов, наблюдений, практических заданий;
- арифметические ошибки в вычислениях;
- небрежное выполнение записей, чертежей, схем, графиков, таблиц;
- орфографические и пунктуационные ошибки.

Критерии оценивания устного ответа на зачете

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если:

1. вопросы раскрыты, изложены логично, без существенных ошибок;
2. показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными при-

мерами;

3. продемонстрировано усвоение ранее изученных вопросов, сформированность компетенций, устойчивость используемых умений и навыков.

Допускаются незначительные ошибки.

Оценка «не зачтено» выставляется, если:

1. не раскрыто основное содержание учебного материала;
2. обнаружено незнание или непонимание большей или наиболее важной части учебного материала;
3. допущены ошибки в определении понятий, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов;
4. не сформированы компетенции, умения и навыки.

Вопросы к зачету

1. Описание макромира в рамках классической физики (механики и электродинамики).
2. Излучение. Абсолютно черное тело. Уравнение Планка. Постоянная Планка ее физический смысл.
3. Корпускулярно-волновой дуализм излучения. Фотоны.
4. Экспериментальные подтверждения корпускулярных свойств излучения и волновых свойств электронов.
5. Спектр атома водорода. Уравнения Бальмера и Ридберга. Теория строения атома Н. Бора.
6. Гипотеза и уравнение Луи де Бройля. Принципы дополнительности Н. Бора и неопределенности В. Гейзенберга.
7. Уравнение Шредингера.
8. Волновая функция. Свойства волновой функции.
9. Операторы и их свойства.
10. Операторы физических величин.
11. Постулаты квантовой механики.
12. Уравнение Шредингера для атома водорода. Переход к сферическим координатам.
13. Разделение переменных и нахождение вида волновых функций.
14. Система квантовых чисел.
15. Атомная орбиталь. Графическое изображение радиальной и угловой частей волновой функции.
16. Расчет средних величин.
17. Спектры водородоподобных атомов. Правила отбора.
18. Условия возникновения и характеристики химической связи.
19. Ковалентная связь в методе валентных связей.
20. Ковалентная связь в методе молекулярных орбиталей.
21. Гомоядерные двухатомные молекулы в ММО.
22. Гетероядерные двухатомные молекулы.
23. Описание многоатомных молекул. Сопоставление энергетических диаграмм орбиталей молекул разного строения.
24. Ионная связь. Ионные соединения. Основные структурные типы ионных соединений. Закономерности в строении ионных кристаллов.
25. Структура простых твердых тел. Энергия ионной связи.
26. Металлические кристаллы. Металлическая связь. Кристаллическая структура металлов.
27. Водородная связь. Определение и основные понятия.
28. Природа водородной связи. Влияние внутримолекулярной водородной связи на реакционную способность веществ.

29. Расположение электронных пар на валентных оболочках.
30. Формы молекул.
31. Введение в теорию симметрии. Симметрия молекул с точки зрения теории групп.
32. Точечные группы симметрии молекул.
33. Нежесткие молекулы.
34. Основные типы структурно нежестких молекул.
35. Энергия образования молекул из простых веществ и свободных атомов.
36. Энтальпии образования молекулы как суммы величин, сопоставляемых отдельным связям.
37. Электрический дипольный момент.
38. Поляризуемость молекулы.
39. Магнитные свойства молекул. Постоянный магнитный момент. Молекулы во внешнем электрическом поле.
40. Поляризуемость при высоких частотах. Показатель преломления.
41. Поляризуемость и оптическая активность. Аддитивные свойства.
42. Полная энергия молекулы.
43. Энергия многоатомной молекулы. Молекулярный терм.
44. Межмолекулярные силы.
45. Роль межмолекулярных сил.
46. Агрегатные состояния вещества.
47. Типы химической связи в твердом теле.
48. Ковалентные кристаллы. Строение ковалентных кристаллов.
49. Полупроводниковые кристаллы.
50. Молекулярные и жидкие кристаллы.

6.3 Оценочные средства для проверки уровня сформированности компетенций: ПК-2

Тесты содержат следующие типы заданий:

Тип задания	№ задания	Вес задания (балл)	Результат оценивания (баллы, полученные за выполнение задания / характеристика правильного ответа)
Задания закрытого типа с выбором одного правильного ответа (1 – 4)	1, 2, 3, 4	1 балл	1 б – полное правильное соответствие; 0 б – остальные случаи
Задания закрытого типа с выбором нескольких правильных ответов (2 из 4)	5, 6, 7	2 балла	2 б – полное правильное соответствие (последовательность вариантов ответа может быть любой); 1 б – если допущена одна ошибка / ответ правильный, но не полный; 0 б – остальные случаи
Задания закрытого типа на установление соответствия (3 на 3 и 4 на 4)	8, 9, 10	2 балла	2 б – полное правильное соответствие; 1 б – если допущена одна ошибка / ответ правильный, но не полный; 0 б – остальные случаи
Задания закрытого типа на установление после-	11, 12, 13	2 балла	2 б – полное правильное соответствие;

довательности			1 б – если допущена одна ошибка / ответ правильный, но не полный; 0 б – остальные случаи
Задания открытого типа с кратким ответом	14, 15	3 балла	3 б – полное правильное соответствие; 0 б – остальные случаи

Формируемая компетенция	Индикаторы сформированности компетенции
ПК-2 Способен осуществлять педагогическую деятельность по профильным предметам (дисциплинам, модулям) в рамках программ основного общего и среднего общего образования	ПК-2.2 Применяет основы теории фундаментальных и прикладных разделов химии (неорганической, аналитической, органической, физической, химии ВМС, химических основ биологических процессов, химической технологии) для решения теоретических и практических задач.

1. Гипотеза М. Планка решила проблему излучения абсолютно черного тела, постулировав, что энергия излучается и поглощается:

- 1) непрерывно;
- 2) дискретными порциями (квантами);
- 3) только при фотоэффекте;
- 4) в зависимости от температуры.

Ответ: 2

2. Квантовое число, определяющее форму электронного облака в атоме водорода:

- 1) главное (n);
- 2) орбитальное (l);
- 3) магнитное (ml);
- 4) спиновое (ms).

Ответ: 2

3. Связь, возникающая за счет обобществления электронной пары между двумя атомами, называется:

- 1) ионной;
- 2) ковалентной;
- 3) металлической;
- 4) водородной.

Ответ: 2

4. Физический смысл квадрата модуля волновой функции $|\Psi|^2$ заключается в том, что эта величина определяет:

- 1) энергию частицы;
- 2) плотность вероятности нахождения частицы;
- 3) импульс частицы;
- 4) траекторию движения частицы.

Ответ: 2

5. Какие из перечисленных положений входят в постулаты Н. Бора? (Выберите два ответа)

- 1) Электрон в атоме может находиться только на определенных стационарных орбитах.
 - 2) Движение электрона описывается уравнением Шредингера.
 - 3) При переходе с одной стационарной орбиты на другую атом поглощает или излучает квант энергии.
 - 4) Волновая функция электрона должна быть непрерывной и конечной.
- Ответ: 1, 3

6. Какие типы связей характеризуются ненаправленностью и ненасыщаемостью? (Выберите два ответа)

- 1) Ковалентная неполярная.
- 2) Металлическая.
- 3) Ионная.
- 4) Водородная.

Ответ: 2, 3

7. Для каких молекул может быть справедлива модель теории отталкивания валентных электронных пар (ОЭПВО)? (Выберите два ответа)

- 1) H_2O .
- 2) $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$.
- 3) SF_6 .
- 4) Бензол (C_6H_6).

Ответ: 1, 3

8. Установите соответствие между физической величиной и ее квантово-механическим оператором.

- 1) Координата (x) : А) x
- 2) Импульс (px) : Б) $-i\hbar (d/dx)$
- 3) Кинетическая энергия (T) : В) $(-\hbar^2/2m) (d^2/dx^2)$

9. Установите соответствие между типом химической связи и примером вещества.

- 1) Ковалентная неполярная : А) Алмаз (C)
- 2) Ионная : Б) Хлорид натрия (NaCl)
- 3) Металлическая : В) Медь (Cu)
- 4) Водородная : Г) Лёд (H_2O)

10. Установите соответствие между понятием и его определением.

- 1) Структурно-нежесткая молекула : А) Молекула, в которой ядра могут занимать несколько различных положений без значительного изменения энергии.
- 2) Теория ОЭПВО : Б) Модель, предсказывающая геометрию молекулы на основе отталкивания электронных пар.
- 3) Конденсированное состояние : В) Агрегатное состояние вещества с высокой плотностью (жидкости, твердые тела).

11. Установите последовательность увеличения энергии электрона в атоме водорода для следующих орбиталей:

- А) 1s
- Б) 2s
- В) 2p
- Г) 3p

12. Расположите типы межмолекулярных взаимодействий в порядке увеличения их средней энергии:

- А) Дисперсионное взаимодействие (силы Лондона)
- Б) Индукционное взаимодействие
- В) Ориентационное взаимодействие (диполь-дипольное)

13. Установите историческую последовательность развития квантовых теорий:

- А) Гипотеза Планка о квантовании энергии.
- Б) Теория Бора атома водорода.
- В) Гипотеза де Бройля о волновых свойствах частиц.
- Г) Уравнение Шредингера.

14. Назовите две основные теории, описывающие природу ковалентной связи.

Ответ: Метод валентных связей (ВС) и метод молекулярных орбиталей (МО).

15. Назовите две основные характеристики ковалентной химической связи.

Ответ: Насыщаемость и направленность.

7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ

Информационные технологии – обучение в электронной образовательной среде с целью расширения доступа к образовательным ресурсам, увеличения контактного взаимодействия с преподавателем, построения индивидуальных траекторий подготовки, объективного контроля и мониторинга знаний студентов.

В образовательном процессе по дисциплине используются следующие информационные технологии, являющиеся компонентами Электронной информационно-образовательной среды БГПУ:

- Система электронного обучения ФГБОУ ВО «БГПУ»;
- Электронные библиотечные системы;
- Мультимедийное сопровождение лекций и практических занятий.

8 ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья применяются адаптивные образовательные технологии в соответствии с условиями, изложенными в разделе «Особенности реализации образовательной программы для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья» основной образовательной программы (использование специальных учебных пособий и дидактических материалов, специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь и т. п.) с учётом индивидуальных особенностей обучающихся.

9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ

9.1 Литература

Основная литература

1. Жидков, В. В. Основы квантовой химии и строение вещества : учебно-методическое пособие для студентов педвузов / В. В. Жидков, И. В. Егорова. – Благовещенск : Издательство БГПУ, 2024. – 305 с.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. вузов / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 382 с. (14 экз.)
3. Шарутина, О.К. Задачи и упражнения по основам квантовой механики и квантовой химии: учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: изд-во БГПУ, 2010. – 203 с. (30 экз.)

4. Егорова, И.В. Строение вещества : учебно-методическое пособие для студентов педвузов / И. В. Егорова. – Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2023. – 249 с.

Дополнительная литература

1. Грибов, Л. А. Квантовая химия: Учебник / Л.А Грибов, С.П. Муштакова. – М.: «Гардарики», 1999. – 390 с. (40 экз.)

9.2 Базы данных и информационно-справочные системы

1. Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
2. Каталог образовательных интернет-ресурсов <http://www.edu.ru>
3. Популярная библиотека химических элементов
<https://web.archive.org/web/20161021151915/http://n-t.ru/ri/ps/>
4. Электронная библиотека по химии МГУ <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>

9.3 Электронно-библиотечные ресурсы

1. Polpred.com Обзор СМИ/Справочник <http://polpred.com/news>.
2. ЭБС «Юрайт» <https://urait.ru/>.

10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА

Для проведения занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используются аудитории, оснащённые учебной мебелью, аудиторной доской, компьютером(рами) с установленным лицензионным специализированным программным обеспечением, коммутатором для выхода в электронно-библиотечную систему и электронную информационно-образовательную среду БГПУ, мультимедийными проекторами, экспозиционными экранами, учебно-наглядными пособиями (карты, таблицы, мультимедийные презентации). Для проведения практических занятий также используется **Учебная лаборатория химической технологии**, оснащённая следующим оборудованием:

- Комплект учебной мебели
- Аудиторная доска
- Компьютер с установленным лицензионным специализированным программным обеспечением
- Мультимедийный проектор
- Принтер
- Экспозиционный экран
- ЯМР-спектрометр низкого разрешения «Спин Трэк» (1 шт.)
- Аквадистиллятор ДЭ-10 (1 шт.)
- Весы GF-300 (1 шт.)
- Весы торсионные ВТ-100 (1 шт.)
- Вискозиметр (4 шт.)
- Иономер (3 шт.)
- Кондуктометр анион-4120 (3 шт.)
- КФК-2 (1 шт.)
- Люксметр (1 шт.)
- Мешалка магнитная П-Э-6100 (2 шт.)
- Модуль «Термический анализ» (3 шт.)
- Модуль «Термостат» (3 шт.)
- Модуль «Универсальный контроллер» (3 шт.)
- Модуль «Электрохимия» (3 шт.)
- Модуль универсальный (6 шт.)
- Набор сит КП-131(1 шт.)
- Поляриметр (1 шт.)
- Потенциометр (1 шт.)

- Центрифуга лабораторная ОПН-8 (с ротором) (1 шт.)
- Штатив для электродов (2 шт.)
- Эксикатор с краном (1 шт.)
- Модуль «Общелабораторный» (1 шт.)
- Спектрофотометр (1 шт.)
- Спектрофотометр КФК-3КМ (1 шт.)
- Комплект ариометров (1 шт.)
- Метроном (1 шт.)
- Мост реохордный с сосудом
- Термостат ТС-1/80 СПУ (1 шт.)
- Штативы для пробирок, нагревательные приборы
- Учебно-наглядные пособия - слайды, таблицы, мультимедийные презентации по дисциплине «Строение вещества и основы квантовой химии».

Самостоятельная работа студентов организуется в аудиториях оснащенных компьютерной техникой с выходом в электронную информационно-образовательную среду вуза, в специализированных лабораториях по дисциплине, а также в залах доступа в локальную сеть БГПУ, в лаборатории психолого-педагогических исследований и др.

Используемое программное обеспечение: Microsoft®WINEDUperDVC AllLng Upgrade/SoftwareAssurancePack Academic OLV 1License LevelE Platform 1Year; Microsoft®OfficeProPlusEducation AllLng License/SoftwareAssurancePack Academic OLV 1License LevelE Platform 1Year; Dr.Web Security Suite; Java Runtime Environment; Calculate Linux.

Разработчик: Жидков В.В., кандидат химических наук, доцент кафедры химии.

11 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ

Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2024/2025 уч. г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2024/2025 учебном году на заседании кафедры (протокол № 8 от 30 мая 2024 г.). В РПД внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 1	
№ страницы с изменением: 23	
В Раздел 9 внесены изменения в список литературы, в базы данных и информационно-справочные системы, в электронно-библиотечные ресурсы. Указаны ссылки, обеспечивающие доступ обучающимся к электронным учебным изданиям и электронным образовательным ресурсам с сайта ФГБОУ ВО «БГПУ».	

Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2025/2026 уч. г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2025/2026 учебном году на заседании кафедры (протокол № 6 от 26 марта 2025 г.).

Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2026/2027 уч. г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2026/2027 учебном году на заседании кафедры (протокол № ___ от ___ 2026 г.). В РПД внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения:	
№ страницы с изменением:	
Исключить:	Включить: