

	Факультет	Естественных наук
	Кафедра	Химии
	Направление подготовки	04.03.01 Химия
	Направленность (профиль)	Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность
	Строение молекул и основы квантовой химии	

Министерство образования и науки Российской Федерации
 Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
 высшего образования
 «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого»
 ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л.Н. Толстого»

УТВЕРЖДЕНА
 на заседании
 Ученого совета университета
 протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Рабочая программа дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии»

Трудоемкость: 5 зачетных единиц

Квалификация выпускника: Бакалавр

Форма обучения: очная

Год начала подготовки: 2014

Заведующий кафедрой
 химии _____ Ю.М. Атрощенко

Декан ФЕН _____ И.В. Шахкельдян

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	3
2. Место дисциплины в структуре опоп бакалавриата.....	3
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	3
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных занятий	4
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	5
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине	6
6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.....	6
6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания.....	6
6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы.....	7
6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.....	10
бальная оценка	Ошибка! Закладка не определена.
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	11
7.1. Основная литература	11
7.2. Дополнительная литература	11
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	13
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем	14
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине	15
12. Аннотация рабочей программы дисциплины	16
13. Лист регистрации изменений к рабочей программе дисциплины	17

1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотнесенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

Планируемые результаты освоения образовательной программы (код и название компетенции)	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования компетенции в процессе освоения образовательной программы
способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК -1).	<p>Выпускник знает: теоретические основы строения молекул и основы квантовой химии;</p> <p>Умеет: применять знания по строению молекул и основам квантовой химии при решении профессиональных задач;</p> <p>Владеет: навыками использования теоретических основ строения молекул и квантовой химии при решении конкретных химических и материаловедческих задач.</p>	в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП
способность использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач (ПК – 8).	<p>Знать основы строения молекул и квантовой химии;</p> <p>Уметь определять связь между строением молекул и свойствами веществ;</p> <p>Владеть приемами использования квантово-химических расчетов при решении конкретных производственных задач.</p>	в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП БАКАЛАВРИАТА

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» относится к дисциплинам Блока 1 базовой части дисциплин направления. Изучение данной дисциплины базируется на освоении студентами дисциплин «Теоретические основы неорганической химии», «Математика», «Физика».

К началу изучения дисциплины студенты должны владеть:

- знаниями основных моделей атома и типов связи;
- умениями классифицировать различные химические системы по типу связи;
- навыками использования математического аппарата для описания строения атома и химической связи.

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» является базовой для дисциплин: «Физическая химии», «Органическая химия», дисциплин по выбору.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем зачетных единиц / часов по формам обучения

Максимальная учебная нагрузка (всего)	180/5
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего)	72
в том числе:	
лекции с применением мультимедийных технологий	26
лабораторные занятия	42
КСРС	4
Самостоятельная работа студента (всего)	72
в том числе:	
внеаудиторная самостоятельная работа по подготовке к лекционным занятиям	12
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к лабораторным занятиям	10
подготовка к контрольной работе	15
выполнение заданий для самостоятельной работы в системе управления обучением MOODLE	5
выполнение индивидуальной расчетно-графической работы	30
Экзамен	36
Промежуточная аттестация в форме экзамена	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Наименование тем (разделов).	Количество академических или астрономических часов по видам учебных занятий			
	Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Другие виды учебных занятий	Самостоятельная работа обучающихся
Раздел 1. Теории строения атомов	10	15		25
<i>Тема 1.1.</i> История развития представлений о строении атомов и молекул.	2	3		5
<i>Тема 1.2.</i> Теории Резерфорда и Бора	2	3		5
<i>Тема 1.3.</i> Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Шредингера.	2	3		5
<i>Тема 1.4.</i> Основные положения современной теории строения атомов. Квантовые числа. Энергетические диаграммы.	2	3		5
<i>Тема 1.5.</i> Строения ядра и ядерный распад	2	3		5
Раздел 2. Приближенные методы решения уравнения Шредингера.	6	9		15
<i>Тема 2.1.</i> Решение простейших задач квантовой химии: атом водорода, многоэлектронный атом	2	3		5
<i>Тема 2.2.</i> Электронные формулы элементов.	2	3		5
<i>Тема 2.3.</i> Свойства индивидуальных атомов	2	3		5
Раздел 3. Описание ковалентной химической связи.	8	12		20
<i>Тема 3.1.</i> Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи	2	3		5
<i>Тема 3.2.</i> Метод ВС	2	3		5
<i>Тема 3.3.</i> Метод МО	2	3		5
<i>Тема 3.4.</i> Химическая связь в координационных соединениях	2	3		5
Раздел 4. Описание ионной и металлической химической связи.	2	6		12

Строение молекул и основы квантовой химии	Б1.В.04		
Тема 4.1. Ионная связь	1	3	6
Тема 4.2. Металлическая связь	1	3	6
КСРС			4
<i>Экзамен</i>			36
ИТОГО: 180 часов	26	42	72

Раздел 1. Теории строения атомов

Тема 1.1. История развития представлений о строении атомов и молекул. Открытие явления радиоактивности. Определение радиоактивности Беккерелем. Современное определение. Явление фотоэффекта. Объяснение появления фототока с позиции теории Эйнштейна. Открытие рентгеновских лучей. Атомные спектры. Уравнение Бальмера. Спектральные серии.

Тема 1.2. Теории Резерфорда и Бора

Тема 1.3. Основы квантовой механики. Работы Луи де Бройля, Гейзенберга, Воображаемый эксперимент, уравнение Шредингера. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновая функция. Математические требования к волновой функции.

Тема 1.4. Основные положения современной теории строения атомов. Квантовые числа. Энергетические диаграммы.

Тема 1.5. Строения ядра и ядерный распад

Раздел 2. Приближенные методы решения уравнения Шредингера.

Тема 2.1. Решение простейших задач квантовой химии: атом водорода, многоэлектронный атом Принцип решения волнового уравнения для атома водорода. Декартова система координат. Квантовые числа. Принципы заполнения атомных орбиталей электронами. Способы изображения атомных орбиталей. Кривые радиального распределения электронной плотности. Способы изображения атомных орбиталей. Угловое распределение электронной плотности. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод самосогласованного поля. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод констант экранирования.

Тема 2.2. Электронные формулы элементов. Электронные семейства элементов. Краткая характеристика. Периодический закон. Периодическая система (ПС) элементов. Связь положения элемента в ПС с его электронным строением.

Тема 2.3. Свойства индивидуальных атомов. Атомный радиус. Закономерности изменения радиуса атома элементов в ПС. Энергия ионизации. Закономерности изменения энергии ионизации элементов в ПС. Энергия сродства к электрону. Закономерности изменения энергии сродства к электрону элементов в ПС. Относительная электроотрицательность. Закономерности изменения относительной электроотрицательности элементов в ПС.

Раздел 3. Описание ковалентной химической связи.

Тема 3.1. Квантовохимический подход к описанию ковалентной химической связи

Тема 3.2. Метод ВС. Основные положения метода ВС. Канонические и резонансные структуры.

Перекрытие атомных орбиталей. Интеграл перекрытия. Свойства химической связи по методу ВС. Насыщаемость. Понятие ковалентности. Направленность. Гибридизация АО. Поляризуемость. Поляризующие действие. Виды связи по симметрии.

Тема 3.3. Метод МО. Основные положения метода МО. Образование МО из исходных АО. Принципы заполнения МО электронами. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 1 периода). Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 2 периода). Энергетические диаграммы гетероядерных молекул (NO, BeH₂, BeF₂, H₂O, CO, CO₂, CH₄, CN⁻, BF₃). Энергетические диаграммы электронодефицитных молекул (B₂H₆). Сравнительная характеристика методов МО и ВС.

Тема 3.4. Химическая связь в координационных соединениях. Применение метода МО к соединениям d – элементов (октаэдрический комплекс). Применение метода МО к соединениям d – элементов (тетраэдрический комплекс). Описание химической связи в координационных соединениях с помощью теории кристаллического поля. Теория кристаллического поля (октаэдрический комплекс). Теория кристаллического поля (тетраэдрический комплекс).

Раздел 4. Описание ионной и металлической химической связи.

Тема 4.1. Ионная связь. Свойства ионной связи. Расчет энергии кристаллической решетки (уравнение Борна). Расчет энергии кристаллической решетки (по циклу Борна — Габера).

Тема 4.2. Металлическая связь. Свойства металлической связи. Теория электронного газа. Зонная теория. Металлические типы решеток.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы студентов по дисциплине представлены в модульной объектно-ориентированной динамической учебной среде Moodle.

Для самостоятельной проработки материала в течение семестра студентам рекомендуется ряд учебно-методических пособий:

1. Строение молекул и основы квантовой химии [Текст]: учебное пособие / авт. сост. М. Б. Никишина. - Тула: Изд-во ТГПУ им. Л. Н. Толстого, 2013. - 57 с.

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

Реализация дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» направлена на формирование компетенций:

(ОПК-1) - способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач;

(ПК-8) способность использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач.

Формирование компетенций осуществляется в несколько этапов в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП, соотнесенными с планируемыми результатами обучения по каждой дисциплине (модулю) и практике.

6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Компетенция «способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач» (ОПК -1).

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
Знания	теоретических основ строения молекул и основ квантовой химии;	Оценка «отлично» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 81 до 100 баллов (при условии, что на экзамене набрано не менее 5 баллов). Оценка «хорошо» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 80 баллов (при условии, что на экзамене набрано не менее 5 баллов). Оценка «удовлетворительно» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 41 до 60 баллов (при условии, что на экзамене набрано не менее 5 баллов). Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если студент в целом за семестр набрал менее 41 балла (или на экзамене набрано менее 5 баллов)
Умения	применять знания по строению молекул и основам квантовой химии при решении профессиональных задач;	
Навыки	использования теоретических основ строения молекул и квантовой химии при решении конкретных химических и материаловедческих задач	

Компетенция «способность использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач» (ПК – 8).

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
Знания	основ строения молекул и	Оценка «отлично» вы-

	квантовой химии;	ставляется, если студент в целом за семестр набрал от 81 до 100 баллов (при условии, что на экзамене набрано не менее 5 баллов). Оценка «хорошо» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 80 баллов (при условии, что на экзамене набрано не менее 5 баллов). Оценка «удовлетворительно» выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 41 до 60 баллов (при условии, что на экзамене набрано не менее 5 баллов). Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если студент в целом за семестр набрал менее 41 балла (или на экзамене набрано менее 5 баллов)
Умения	определять связь между строением молекул и свойствами веществ;	
Навыки	использования квантово-химических расчетов при решении конкретных производственных задач	

Критерии оценивания компетенций формируются на основе балльно-рейтинговой системы с помощью всего комплекса методических материалов, определяющих процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих данный этап формирования компетенций (пункты 6.3, 6.4).

6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Типовые контрольные и тестовые задания.

ВАРИАНТ №1.

1. Укажите, какие утверждения являются правильными:

- а) каждый период включает элементы А- и Б-групп;
- б) d-элементы расположены между f-элементами (слева) и р-элементами (справа);
- в) нейтральные атомы элементов одной и той же А-группы имеют одинаковое число валентных электронов;

г) атомы пр-элементов больших периодов имеют незаполненный (n-1)d-подуровень;

д) число валентных электронов у атомов А- и Б-групп с одинаковым номером одно и то же;

е) атомы всех благородных газов содержат заполненные s- и р-подуровни.

2. Руководствуясь Периодической системой, укажите символ химического элемента, нейтральному атому которого отвечает следующая электронная формула:

а) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ б) $1s^2 2s^2 2p^5$ в) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

г) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$ д) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$ е) $1s^2 2s^2$

3. Даны координаты элемента в Периодической системе.

Координаты элемента – 3 период IVA группа; 5 период VIIA группа; 4 период VIIБ группа; 3 период VIA группа; 4 период IIA группа; 4 период VIIIA группа. Укажите число валентных подуровней (на которых есть хотя бы один электрон) и число электронов на этих подуровнях для нейтрального атома.

4. Укажите квантовые числа (n, l, ml, ms) электрона, который является последним по по-

рядку заполнения, и определите число неспаренных электронов в атоме химического элемента. Координаты элемента – 3 период IVA группа; 5 период VIIA группа; 4 период VIIB группа; 3 период VIA группа; 4 группа IIA группа; 4 период VIIIA группа.

5. Составьте электронную конфигурацию одноатомного иона с указанным зарядом (формальным или реальным). Определите общее число валентных электронов и число неспаренных электронов.

Координаты элемента	3 период IVA группа	5 период VIIA группа	4 период VIIB группа	3 период VIA группа	4 период IIA группа	4 период VIIIA группа
Формальный или реальный заряд	-IV	+III	+IV	2-	2+	+II

6. Чему равно число энергетических подуровней для данного энергетического уровня? Каким значением главного квантового числа характеризуется энергетический уровень, если он имеет 4 подуровня? Дайте их буквенное обозначение.

7. Напишите электронные и электронно-графические формулы атомов с порядковыми номерами 27, 83. Сколько свободных f-орбиталей в атомах этих элементов?

8. Квантовые числа для электронов внешнего энергетического уровня атома некоторого элемента имеют следующие значения: $n = 5$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = +1/2$. Сколько свободных 4d-орбиталей содержит атом данного элемента? Напишите электронную и электронно-графическую формулу данного атома.

9. Какое значение имеет:

а) орбитальное квантовое число для энергетических подуровней, емкость которых равна 10 и 14;

б) главное квантовое число для энергетических уровней, емкость которых равна 32, 50, 72?

10. Природный водород состоит из двух изотопов – протия и дейтерия с массовыми долями 99,98 % и 0,02 % соответственно. Вычислите атомную массу водорода.

11. При бомбардировке ядер атомов бора $^{10}_5\text{B}$ нейтронами был получен изотоп лития ^7_3Li . Определите промежуточное ядро и выброшенную частицу. Напишите уравнение реакции.

12. Какие элементы образуются при α -распаде ядер атомов: $^{210}_{84}\text{Po}$; $^{238}_{92}\text{U}$; $^{214}_{82}\text{Pb}$?

13. Радиоактивный иод $^{131}_{53}\text{I}$ имеет период полураспада, равный 8 дням. Если взять 100 мг этого изотопа, то сколько его останется через 16 дней?

14. Какую энергию несут кванты света с длиной волны 550 и 500 нм?

15. Неопределенность положения электрона равна 10^{-10} м. Какой будет при этом неопределенность в импульсе и скорости?

Примерные темы индивидуальных проектных заданий

Для элемента с порядковым номером равным номеру варианта провести следующие расчеты:

1. Написать электронную формулу элемента и показать графически заполнение электронами всех атомных орбиталей.

2. Посчитать энергию внешнего электрона элемента.

3. Определить массу одного атома элемента и его объем.

4. Определить массу одной молекулы простого вещества элемента.

5. Исходя из положения элемента в ПС, перечислить возможные степени окисления атома элемента в соединениях с другими элементами.

6. Написать формулу оксида, хлорида, гидрида, сульфида.

7. Рассчитать длину связи в молекулах оксида, хлорида, гидрида, сульфида, используя справочные значения ковалентных радиусов.

8. Вычислить длину диполя водородного и кислородного соединения элемента.

9. Изобразить связь в молекуле простого вещества элемента с помощью метода ВС.

10. Изобразить связь в молекуле простого вещества элемента с помощью энергетической диа-

граммы метода МО, указать кратность связи и написать формулу.

11. Указать тип гибридизации атома элемента в молекулах всех возможных оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соединений).

12. Указать все виды связей (σ , π , δ) в молекулах оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соединений).

13. Указать значения валентных углов в молекулах оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соединений).

14. Указать форму молекул оксидов (в случае кислорода – молекулы водородных соединений).

15. Вычислить энергию образования ионного соединения АВ и энергию взаимодействия ионов A^+ и B^- .

Для вариантов 1, 5, 6, 7, 8, 9, 14, 15, 16, 17: А – калий, В – элемент с порядковым номером, равным номеру элемента.

Для вариантов 3, 4, 11, 12, 13, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28: В – хлор, А – элемент с порядковым номером, равным номеру элемента.

Для вариантов 2, 10, 18: А – элемент с порядковым номером равным (номер варианта +1), В – элемент с порядковым номером равным (номер варианта -1).

Вопросы к экзамену

1. Открытие явления радиоактивности. Определение радиоактивности Беккерелем. Современное определение.
2. Явление фотоэффекта. Объяснение появления фототока с позиции теории Эйнштейна.
3. Открытие рентгеновских лучей.
4. Атомные спектры. Уравнение Бальмера. Спектральные серии.
5. Модель атома Резерфорда.
6. Модель атома Бора.
7. Теория Луи де Бройля.
8. Принцип неопределенности Гейзенберга. Воображаемый эксперимент.
9. Уравнение Шредингера.
10. Волновая функция. Математические требования к волновой функции.
11. Принцип решения волнового уравнения для атома водорода.
12. Декартова система координат.
13. Квантовые числа.
14. Принципы заполнения атомных орбиталей электронами.
15. Способы изображения атомных орбиталей. Кривые радиального распределения электронной плотности.
16. Способы изображения атомных орбиталей. Угловое распределение электронной плотности.
17. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод самосогласованного поля.
18. Методы решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод констант экранирования.
19. Электронные семейства элементов. Краткая характеристика.
20. Периодический закон. Периодическая система (ПС) элементов. Связь положения элемента в ПС с его электронным строением.
21. Атомный радиус. Закономерности изменения радиуса атома элементов в ПС.
22. Энергия ионизации. Закономерности изменения энергии ионизации элементов в ПС.
23. Энергия сродства к электрону. Закономерности изменения энергии сродства к электрону элементов в ПС.
24. Относительная электроотрицательность. Закономерности изменения относительной электроотрицательности элементов в ПС.
25. Теория валентных связей (ВС). Основные положения метода ВС. Канонические и резонансные структуры.
26. Теория валентных связей (ВС). Перекрытие атомных орбиталей. Интеграл перекрывания.
27. Свойства химической связи по методу ВС. Насыщаемость. Понятие ковалентности.
28. Свойства химической связи по методу ВС. Направленность. Гибридизация АО.

29. Теория валентных связей (ВС). Поляризуемость. Поляризующее действие.
30. Теория валентных связей (ВС). Виды связи по симметрии.
31. Метод МО. Основные положения метода МО.
32. Метод МО. Образование МО из исходных АО.
33. Метод МО. Принципы заполнения МО электронами.
34. Метод МО. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 1 периода).
35. Метод МО. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул (элементы 2 периода).
36. Метод МО. Энергетические диаграммы гетероядерных молекул (NO , BeH_2 , BeF_2 , H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , CN^- , BF_3).
37. Метод МО. Энергетические диаграммы электронодефицитных молекул (B_2H_6).
38. Сравнительная характеристика методов МО и ВС.
39. Применение метода МО к соединениям d – элементов (октаэдрический комплекс).
40. Применение метода МО к соединениям d – элементов (тетраэдрический комплекс).
41. Описание химической связи в координационных соединениях с помощью теории кристаллического поля.
42. Теория кристаллического поля (октаэдрический комплекс).
43. Теория кристаллического поля (тетраэдрический комплекс).
44. Ионная связь. Свойства.
45. Ионная связь. Расчет энергии кристаллической решетки (уравнение Борна).
46. Ионная связь. Расчет энергии кристаллической решетки (по циклу Борна — Габера).
47. Металлическая связь. Свойства.
48. Металлическая связь. Теория электронного газа.
49. Металлическая связь. Зонная теория.
50. Металлические типы решеток.

6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

По дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии» разработан комплекс учебно-методических материалов в печатном и электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролирующие функции. В качестве контролирующей функции комплекс используется для текущего и промежуточного контроля успеваемости. Помимо этого он полностью обеспечивает возможность самостоятельной работы студента по материалам курса. В комплекс входят следующие учебно-методические материалы: методические рекомендации по самостоятельной работе студентов (в электронном и печатном виде), краткий курс лекций (в электронном виде), тестовые задания, индивидуальные кейс-задания.

Лабораторные занятия, реализуемые в соответствии с тематическим планированием дисциплины (раздел 4), обеспечены методическими рекомендациями, представленными в печатном или электронном виде.

Учебно-методические материалы комплекса используются выборочно, в зависимости от потребности.

Оценивание знаний, умений и навыков студентов происходит согласно бально-рейтинговой системе, которая выложена в электронном пространстве Moodle, для каждого этапа обучения.

Контроль и оценка результатов освоения учебной дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольных работ, тестирования, а также выполнения обучающимися самостоятельных работ.

Бально-рейтинговая система оценки знаний на первом этапе.

№ п/п	Вид контроля знаний	Бальная оценка
1.	Посещение лабораторных занятий (1 балл)	15 баллов
2.	Контрольная работа № 1	15 баллов
3.	Контрольная работа № 2	10 баллов

4.	Самостоятельная работа по теме «Атомно-молекулярное учение»	5 баллов
5.	Самостоятельная работа по теме «Корпускулярно-волновые свойства микрочастиц»	5 баллов
6.	Самостоятельная работа по теме «Электронные оболочки атомов»	5 баллов
7.	Самостоятельная работа по теме «Строение ядра»	5 баллов
8.	Индивидуальная расчетно-графическая работа	10 баллов
Количество баллов в семестре:		70 баллов
Количество баллов на экзамене:		30 баллов
Баллы		Итоговая оценка
41-60		Удовлетворительно
61-80		Хорошо
81-100		Отлично

7. ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Основная литература

1. Строение молекул и основы квантовой химии [Текст]: учебное пособие / авт. сост. М. Б. Никишина. - Тула: Изд-во ТГПУ им. Л. Н. Толстого, 2013. - 57 с.

7.2. Дополнительная литература

1. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст]: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности. ВПО 020101.65"Химия" / А. И. Ермаков. - М.: ЮРАЙТ, 2010. - 555 с.

2. Цирельсон, Владимир Григорьевич. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст]: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по химико-технологическим направлениям и специальностям / В. Г. Цирельсон. - 3-е изд. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с.

3. Гельман, Ганс Густавович. Квантовая химия [Текст]: научное издание / Г. Гельман. - 2-е изд., доп. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 533 с.

б) периодические издания:

1. Вестник БГУ. Серия 2: Химия. Биология. География [Электронный ресурс]: сайт / Белорусский государственный университет. Минск. 1973-2014. URL: <http://www.bsu.by/ru/main.aspx?guid=184121>.

2. Вестник Московского университета. Серия 2: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Химический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Москва. 1986-2014. URL: <http://www.chemnet.ru/rus/vmgu/welcome.html>.

3. Вестник Пермского университета. Серия: Химия. [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2011-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=32574>.

4. Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: Физика. Химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1969-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9468>.

5. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет). Челябинск. 2009-2014. URL: <http://www2.susu.ac.ru/ru/science/publish/vestnik>.

6. Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Сибирский федеральный университет. Красноярск. 2008-2014. URL: <http://journal.sfu-kras.ru/home>.

7. Известия Академии наук. Серия химическая [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1961-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7833>.

8. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Физика и химия [Элек-

тронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2001-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=38071>.

9. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2000-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9907>.

10. European Reviews of Chemical Research [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=51199>

8. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и описание ресурса	Адрес ресурса в сети Интернет	Режим доступа
Национальный цифровой ресурс Руконт (Электронная библиотечная система)	http://www.rucont.ru	Свободный доступ в локальной сети университета к электронной библиотеке ТГПУ им. Л.Н. Толстого, сформированной по технологии «Контекстум» на основе функционала сайта «РУКОНТ». Доступ по паролям из внешней сети через проху-сервер
Он-лайн служба «Ист Вью»	http://www.ebiblioteka.ru	БД «Издания по общественным и гуманитарным наукам», «Вестники Московского университета», «Журналы России по вопросам педагогики и образования». Свободный доступ в локальной сети университета, доступ по паролям из внешней сети через проху-сервер
Университетская библиотека Он-лайн	http://www.biblioclub.ru	Свободный доступ в локальной сети университета, неограниченный доступ по паролям из внешней сети
Электронно-библиотечная система Ibooks.ru («Айбукс»)	http://ibooks.ru/	Свободный доступ в локальной сети университета, неограниченный доступ по паролям из внешней сети
Научная электронная библиотека	http://www.eLibrary.ru	Полные тексты изданий, представленных в открытом доступе, 42 наименования научных журналов по подписке. Свободный доступ в локальной сети университета, доступ по паролям из внешней сети через проху-сервер
Федеральный портал Российское образование	http://www.edu.ru	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети
Единое окно доступа к образовательным ресурсам	http://window.edu.ru	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети
SCIENCE ONLINE [Полнотекстовый мультидисциплинарный ресурс]	http://www.sciencemag.org	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета
Annual Reviews [электронная база обзоров научной литературы на английском языке]	http://www.annualreviews.org	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета
SAGE Journals Online [англоязычный полнотекстовый архив журналов]	http://online.sagepub.com/	Свободный доступ в локальной сети университета, доступ по паролям из внешней сети через проху-сервер
Естественнонаучный образовательный портал	http://www.en.edu.ru	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети
Библиотека РФФИ	http://www.rfbr.ru	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети

Научно-информационный портал ВИНТИ	http://science.viniti.ru	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети
Портал фундаментального химического образования России	http://www.chem.msu.su	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети
Библиотека химического факультета МГУ	http://www.chem.msu.ru/rus/library	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети
Научная сеть SciPeople	http://scipeople.ru	Свободный неограниченный доступ в локальной сети университета и из внешней сети

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Для успешного изучения дисциплины предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- курс лекций в виде презентаций;
- задания для самостоятельной работы студентов;

- комплекс текущих тестовых заданий и контрольных работ в электронном и печатном виде для контроля знаний по предмету на лабораторных занятиях и КСРС.

Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине, которую следует получить на сайте университета в сети интернет в системе «Электронное обучение» (MOODLE – модульная объектно-ориентированная динамическая учебная среда) и использовать для подготовки к лабораторным занятиям. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем.

Готовясь к лабораторным занятиям, студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подготовиться к выполнению практической работы, оформить лабораторный журнал по разработанной схеме, выполнить задания для самостоятельной работы.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются информационные технологии, охватывающие ресурсы (компьютеры, программное обеспечение и сети), необходимые для управления информацией (создание, хранение, управление, передача и поиск информации):

- технические средства: компьютерная техника и средства связи (ноутбук, проектор, экран, USB-накопители и т.п.);
- коммуникационные средства (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты, личного кабинета студента и преподавателя, видеотрансляций);
- организационно-методическое обеспечение (электронные учебные и учебно-методические материалы, компьютерное тестирование, использование электронных мультимедийных презентаций при проведении лекционных и лабораторных занятий);
- программное обеспечение Microsoft Office (Excel, Power Point, Word и т.д.), Skype, поисковые системы, электронная почта и т.п.;
- среда электронного обучения ТГПУ им. Л.Н. Толстого <http://moodle.tsput.ru>.

комплект лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Программное обеспечение Microsoft Office XP Professional Win32 Russian– Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
4. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г.
5. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
6. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 1894-150512-101810 от 12-05-2015 г.

современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал "Информационно-коммуникационные технологии в образовании" <http://www.ict.edu.ru>.

11. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованные мультимедийными средствами обучения.
2. Учебные аудитории для проведения лабораторных занятий.
3. Компьютерные классы с доступом в интернет для работы с информационно-правовыми системами, в том числе «Гарант» и с доступом к электронно-библиотечной системе.
4. Аудитории для самостоятельной работы студентов, оснащенные компьютерной техникой, имеющей доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронной информационно-образовательной среде ТГПУ им. Л.Н. Толстого, внутривузовскому сетевому окружению.

12. АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ.

1. Планируемые результаты обучения при освоении дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

- способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК -1);
- способность использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач (ПК-8).

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести:

знания:

- теоретических основ строения молекул и основ квантовой химии; (ОПК -1);
- основ строения молекул и квантовой химии; (ПК-8);

умения:

- применять знания по строению молекул и основам квантовой химии при решении профессиональных задач (ОПК -1);
- определять связь между строением молекул и свойствами веществ (ПК-8);

навыки:

- использования теоретических основ строения молекул и квантовой химии при решении конкретных химических и материаловедческих задач (ОПК -1);
- использования квантово-химических расчетов при решении конкретных производственных задач (ПК-8).

2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» относится к дисциплинам вариативной части блока Б.1 базовой части дисциплин направления. Изучение данной дисциплины базируется на освоении студентами дисциплин теоретические основы неорганической химии, математика, физика.

К началу изучения дисциплины студенты должны владеть:

- знаниями основных моделей атома и типов связи;
- умениями классифицировать различные химические системы по типу связи;
- навыками использования математического аппарата для описания строения атома и химической связи.

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» является базовой для дисциплин: «Физическая химия», «Органическая химия», дисциплин по выбору.

3. Объем дисциплины составляет 5 зачетных единиц.

4. Образовательный процесс осуществляется на русском языке.

5. Разработчик: доцент кафедры химии, кандидат химических наук Блохин И.В.

13. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2016-2017 учебный год

В рабочую программу дисциплины внесены изменения в части обновления состава необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 2 от 16 февраля 2017 г.

2017-2018 учебный год

Обновлен состав необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения.

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
3. Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian - контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
4. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
5. Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional - контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.
6. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
8. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 17E0-170518-102844-823-690 от 18-05-2017 г.

Обновлен состав современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал базы данных правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» <http://www.ict.edu.ru>.
5. Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных <http://webofscience.com>.
6. Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) <http://neicon.ru>.
7. Базы данных издательства Springer <https://link.springer.com>.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Разработчик:

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность
Блохин И.В.	Кандидат химических наук	Доцент	Доцент кафедры химии