

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ЛПУ»)

Факультет естественных наук

Кафедра химии и биохимии

УТВЕРЖДАЮ

Врио-декана факультета
естественных наук

М.В. Воронов
«15» ИЮНЯ 2021 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Строение молекул и основы квантовой химии

По направлению подготовки 04.03.01 Химия

Профиль подготовки Медицинская и фармацевтическая химия

Квалификация выпускника бакалавр

Форма обучения очная

Курс 2

Луганск, 2021 г.

Рабочая программа учебной дисциплины является частью основной профессиональной образовательной программы для подготовки бакалавров по направлению подготовки 04.03.01 Химия и профильные Медицинская и фармацевтическая химия, очной формы обучения.

Рабочая программа учебной дисциплины разработана в соответствии с ФГОС ВО — бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 17 июля 2017 г. № 671 (с изменениями и дополнениями), Профессиональным стандартом, утвержденным Приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации «Об утверждении профессионального стандарта» от 18 октября 2013 г. № 544н (с изменениями и дополнениями), Профессиональным стандартом, утвержденным Приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации «Об утверждении профессионального стандарта» от 22 мая 2017 г. № 431н и Профессиональным стандартом, утвержденным Приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации «Об утверждении профессионального стандарта» от 22 мая 2017 г. № 432н.

СОСТАВИТЕЛЬ:

доцент кафедры химии и биохимии ФГБОУ ВО «ДГПУ», кандидат физико-математических наук, Тихий Александр Александрович.

Утверждена на заседании кафедры химии и биохимии

Протокол от «12» сентября 2018 г. № 1

Заведующий кафедрой химии и биохимии

 В.Д. Дяченко

Одобрена на заседании учебно-методической комиссии факультета естественных наук

Протокол от «12» сентября 2018 г. № 1

Председатель учебно-методической комиссии
факультета естественных наук

 С.Н. Несторов

СОГЛАСОВАНО

Заведующий учебно-методическим отделом

 В.В. Савелов

Структура и содержание дисциплины

1. Цели и задачи дисциплины, ее место в учебном процессе

Целью изучения дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» является изучение основных теорий и представлений о строении молекул и вещества, основных квантово-химических подходах его исследования.

Задачи:

- рассмотреть основные научные теории описывающие строение молекул и вещества;
- рассмотреть теоретические основы и общие принципы способов и методов изучения строения вещества;
- научить студентов основам квантовой механики в приложении к решению химических задач;
- обучение практическому использованию теоретических и расчетных методов квантовой химии.

2. Место дисциплины в структуре ООП.

Учебная дисциплина Строение вещества относится к блоку 1 Дисциплины, Обязательная часть.

Необходимыми условиями для освоения дисциплины являются:

- **знания** атомно-молекулярной теории; общей и органической химии; квантовой физики; электродинамики; механики; высшей математики; дифференциальных уравнений; теории функций комплексных переменных;
- **умения** пользоваться учебной, научной, научно-популярной литературой, сетью Интернет для профессиональной деятельности; вести поиск, превращать прочитанное в средство для решения типовых задач; составления и решения дифференциальных уравнений;
- **навыки** работы с базовыми технологиями преобразования информации, текстовыми, табличными редакторами, поиск в сети интернет; самостоятельной работы с учебной, научной и справочной литературой; вести поиск и делать обобщающие выводы; прикладного использования математического аппарата.

Содержание дисциплины является логическим продолжением содержания дисциплин неорганическая и органическая химия, физика, математика, информационные технологии и служит основой для освоения дисциплин строение вещества, коллоидная химия, кристаллохимия, физико-химические методы исследования вещества, физическая химия, химия высокомолекулярных соединений, химические основы биологических процессов, фармацевтическая химия.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесённых с индикаторами достижения компетенций

| Код по ФГОС ВО | Индикатор достижения | Результаты обучения по дисциплине |
|----------------------|---|--|
| Универсальные | | |
| | | |
| Общепрофессиональные | | |
| ОПК-3 ОПК-4 | ОПК-3.1 ОПК-3.2 ОПК-4.1 ОПК-4.2 ОПК-4.3 | <p>Знает: принципы образования молекулярных систем; роль представлений о строении вещества как теоретического фундамента современной химии.</p> <p>Умеет: Предложить способы и принципиальные схемы получения вещества с заранее заданными свойствами; предсказывать свойства вещества исходя из его химического и структурного строения.</p> <p>Владеет навыками: квантово-химического описания свойств вещества; использования теоретических и расчетных методов квантовой химии для решения практических задач.</p> |
| Профессиональные | | |
| | | |

4. Структура и содержание учебной дисциплины

4.1. Объем учебной дисциплины и виды учебной работы

| Вид учебной работы | Объем часов (зач. ед.) | |
|---|----------------------------------|---------------|
| | Очная форма | Заочная форма |
| Общая учебная нагрузка (всего) | 144 (4 зач. ед) | - |
| Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего) | 104 | - |
| в том числе: | | |
| Лекции | 24 | - |
| Семинарские занятия | - | - |
| Практические занятия (в том числе интерактив) | 40 | - |
| Лабораторные работы | 40 | - |
| Контрольные работы (модули) | - | - |
| КСР | 36 | - |
| Курсовая работа (курсовой проект) | - | - |
| Другие формы и методы организации образовательного процесса (<i>групповые дискуссии, ролевые игры, тренинг, компьютерные симуляции, интерактивные лекции, семинары, анализ деловых ситуаций и т.п.</i>) | - | - |

| | | |
|---|---------|---|
| Самостоятельная работа студента (всего) | 4 | - |
| Итоговая аттестация | Экзамен | - |

4.2. Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Введение. Доказательство сложного строения атома.

Понятия вещество, материя, атом, химический элемент, молекула. Атомные спектры. Виды спектров. Факты, подтверждающие наличие дискретных уровней энергии электронов. Квантовая модель атома Н. Бора.

Тема 2. Волновые свойства электрона.

Двойственная природа света. Закон взаимосвязи массы и энергии. Волны де Бройля. Корпускулярно-волновые свойства микрочастиц. Дуализм электрона. Принцип неопределенности Гейзенберга. Расчет минимальной энергии электрона. Сравнение с теорией Н. Бора. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Требования, предъявляемые к волновой функции.

Тема 3. Частные случаи решения уравнения Шредингера.

Решение уравнения Шредингера для одномерного потенциального ящика. Расчет вероятности нахождения частицы и ее энергии. Трехмерный потенциальный ящик. Квантовые числа. Вырожденные уровни энергии. Вращательный момент импульса. Одномерный ротатор.

Тема 4. Периодический закон и Периодическая система элементов Д.И. Менделеева.

Основные характеристики химической связи: длина, направленность, прочность. Валентные углы. Расчет средней энергии связи. Физические методы определения структуры молекул: электронография, рентгеноструктурный анализ, радиоспектроскопия. Современная формулировка периодического закона. Периодические изменения радиуса атома, энергии ионизации, сродства к электрону, электроотрицательности. Объяснение периодического закона с точки зрения строения атома. s , p , d , f -элементы. Научное значение периодического закона. Открытия новых элементов. Устойчивость элементов. История развития представлений о химической связи и валентности: гравитационная, электрохимическая, электровалентная, ковалентная.

Тема 5. Основные типы химической связи.

Энергия ионной связи, энергия кристаллической решетки. Поляризация и поляризуемость ионов. Квантово-химическое объяснение ковалентной связи. Метод валентных связей. Решение уравнения Шредингера с использованием приближенных функций. Ионная и ковалентная связь.

Тема 6. Метод молекулярных орбиталей.

Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Выражение для волновых функций простейших молекул. Условия комбинирования АО с образованием МО. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие МО. Энергия МО. Порядок расположения МО по энергии. Электронные формулы и энергетические диаграммы гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул

элементов первого и второго периодов. Диамагнетизм, парамагнетизм, порядок связи. Сравнение методов валентных связей и МО.

Тема 7. Строение вещества в конденсированном состоянии.

Особенности кристаллического состояния. Типы кристаллических решеток: атомные, молекулярные, ионные, металлические. Металлы и полупроводники. Собственная и примесная проводимость. Растворы электролитов: сольватация, гидратация, теплота гидратации, кристаллогидраты. Особенности наносостояния вещества. Агрегатное состояние. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь, силы Ван-дер-Ваальса.

4.3. Лекции

| № п/п | Название темы | Объем часов | |
|-------|---|-------------|---------------|
| | | Очная форма | Заочная форма |
| 1 | Понятия вещество, материя, атом, химический элемент, молекула. Атомные спектры. Виды спектров. Факты, подтверждающие наличие дискретных уровней энергии электронов. Квантовая модель атома Н. Бора. Двойственная природа света. Закон взаимосвязи массы и энергии. Волны де Бройля. Корпускулярно-волновые свойства микрочастиц. Дуализм электрона. Принцип неопределенности Гейзенберга. | 4 | |
| 2 | Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Требования, предъявляемые к волновой функции. Решение уравнения Шредингера для одномерного потенциального ящика. Расчет минимальной энергии электрона. Квантовые числа. Врожденные уровни энергии. Вращательный момент импульса. | 4 | |
| 3 | Основные характеристики химической связи: длина, направленность, прочность. Валентные углы. Расчет средней энергии связи. Энергия ионной связи, энергия кристаллической решетки. Поляризация и поляризуемость ионов. Квантово-химическое объяснение ковалентной связи. | 4 | |
| 4 | Метод валентных связей. Решение | 4 | |

| | | | |
|---------------|---|-----------|--|
| | уравнения Шредингера с использованием приближенных функций. Ионная и ковалентная связь. | | |
| 5 | Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Выражение для волновых функций простейших молекул. | 4 | |
| 6 | Условия комбинирования АО с образованием МО. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие МО. Энергия МО. Порядок расположения МО по энергии. Электронные формулы и энергетические диаграммы гомонуклеарных и гетеронуклеарных молекул элементов первого и второго периодов. | 4 | |
| Итого: | | 24 | |

4.4. Практические (семинарские) занятия

| № п/п | Название темы | Объем часов | |
|-------|---|-------------|---------------|
| | | Очная форма | Заочная форма |
| 1 | Атомные спектры. Квантовая модель атома Н. Бора. | 4 | |
| 2 | Двойственная природа света. Закон взаимосвязи массы и энергии. Волны де Бройля. Корпускулярно-волновые свойства микрочастиц. Дуализм электрона. Принцип неопределенности Гейзенберга. | 4 | |
| 3 | Расчет минимальной энергии электрона. Уравнение Шредингера. | 4 | |
| 4 | Расчет вероятности нахождения частицы и ее энергии. Расчет вероятности нахождения частицы и ее энергии. Трехмерный потенциальный ящик. | 4 | |
| 5 | Квантовые числа. Вырожденные уровни энергии. Вращательный момент импульса. | 4 | |
| 6 | Расчет средней энергии химической связи. | 4 | |
| 7 | Энергия ионной связи, энергия кристаллической решетки. Поляризация и поляризуемость ионов. | 4 | |
| 8 | Метод валентных связей. | 4 | |
| 9 | Метод линейной комбинации атомных | 4 | |

| | | | |
|---------------|---|-----------|--|
| | орбиталей. | | |
| 10 | Диамagnetизм, парамагнетизм, порядок связи. | 4 | |
| Итого: | | 40 | |

4.5. Лабораторные работы

| № п/п | Название темы | Объем часов | |
|---------------|---|-------------|---------------|
| | | Очная форма | Заочная форма |
| 1 | Атомные спектры. | 4 | |
| 2 | Двойственная природа света. | 4 | |
| 3 | Моделирование молекул. | 4 | |
| 4 | Метод линейной комбинации атомных орбиталей. | 4 | |
| 5 | Метод валентных связей. | 4 | |
| 6 | Расчет средней энергии химической связи. | 4 | |
| 7 | Теория функционала плотности. | 4 | |
| 8 | Моделирование реакций радикального распада. | 4 | |
| 9 | Моделирование нерадикальных реакций мономолекулярного распада. | 4 | |
| 10 | Поиск переходного состояния методами квадратичного синхронного транзита | 4 | |
| Итого: | | 40 | |

4.6. Самостоятельная работа студентов

| № п/п | Название темы | Вид СРС | Объем часов | |
|-------|---|------------------------------------|-------------|---------------|
| | | | Очная форма | Заочная форма |
| 1 | Расчет средней энергии связи. Физические методы определения структуры молекул: электронография, рентгеноструктурный анализ, радиоспектроскопия. Современная формулировка периодического закона. | подготовка к практическим занятиям | 2 | |
| 2 | Научное значение периодического закона. Открытия новых элементов. Устойчивость | подготовка к практическим занятиям | 2 | |

| | | | | |
|---------------|--|--|----------|--|
| | элементов. История развития представлений о химической связи и валентности: гравитационная, электрохимическая, электровалентная, ковалентная. | | | |
| Итого: | | | 4 | |

4.7. Курсовые работы не предусмотрены учебным планом.

5. Методическое обеспечение, образовательные технологии

Преподавание дисциплины ведется с применением следующих видов образовательных технологий:

Информационные технологии: использование электронных учебников, методических рекомендаций при подготовке к лекциям и практическим занятиям.

6. Формы контроля освоения дисциплины.

Текущая аттестация студентов производится в дискретные временные интервалы лектором в следующих формах:

- письменные контрольные работы;
- ответы на практических (семинарских) занятиях.

Итоговый контроль по результатам освоения дисциплины проходит в форме письменного экзамена (1 семестр) (включает в себя ответы на теоретические вопросы).

Система накопления баллов по видам работ отражается в таблице:

Система оценивания учебных достижений студентов очной формы обучения

| Вид текущей учебной работы | Количество баллов |
|---------------------------------|-------------------|
| 2 семестр | |
| Ответы на практических занятиях | 25 |
| Выполнение лабораторных работ | 25 |
| КСР | 10 |
| Экзамен | 40 |
| Итого за семестр: | 100 |

Накопительная система оценивания по 100-балльной шкале

| Четырехбалльная система оценивания экзамена | 100-балльная шкала | Буквенная шкала, соответствующая 100-балльной шкале | Система оценивания зачета |
|---|--------------------|---|---------------------------|
| Отлично | 90–100 | A – отлично – теоретическое содержание курса | |

| | | | |
|---------------------|--------------|--|------------|
| | | освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному | Зачтено |
| Хорошо | 83–89 | В – очень хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения большинства из них оценено числом баллов, близким к максимальному | |
| Хорошо | 75–82 | С – хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью; некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые виды заданий выполнены с ошибками | |
| Удовлетворительно | 63–74 | Д – удовлетворительно – теоретическое содержание дисциплины освоено частично, но пробелы не носят существенного характера; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, содержат ошибки | |
| Удовлетворительно | 50–62 | Е – посредственно – теоретическое содержание курса освоено частично; некоторые практические навыки работы не сформированы, многие предусмотренные программой обучения учебные задания не выполнены либо качество выполнения некоторых из них оценено числом баллов, близким к минимальному | |
| Неудовлетворительно | 21–49 | FX – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса освоено частично; необходимые практические навыки работы не сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий не выполнено либо качество их выполнения оценено числом баллов, близким к минимальному; при дополнительной самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий | Не зачтено |
| Неудовлетворительно | 0–20 | F – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса не освоено; необходимые | |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | практические навыки работы не сформированы; все выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к какому-либо значимому повышению качества выполнения учебных заданий | |
|--|--|--|--|

7. Учебно-методическое и программно-информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Краснов К.С. Строение вещества. Термодинамика : В 2 кн. / К.С. Краснов; под ред. Краснова К.С. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Высш. шк., 1995. - 512с. - ISBN 5-06-002913-1.

2. Новиков А.Ф. Строение вещества [Электронный ресурс]: электронные оболочки атомов. Химическая связь. Конденсированное состояние вещества. Учебное пособие/ Новиков А.Ф.— Электрон. текстовые данные.— СПб.: Университет ИТМО, 2013.— 93 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/68156.html>.— ЭБС «IPRbooks»

3. Строение вещества. Задачи для защиты модуля 1 по курсу химии [Электронный ресурс]: методические указания/ А.М. Голубев [и др.].— Электрон. текстовые данные.— М.: Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2013.— 24 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31567.html>.— ЭБС «IPRbooks»

б) дополнительная литература:

1. Курс общей физики. Кн.3 : Термодинамика. Статистическая физика. Строение вещества : учеб. пособие : в 3 кн. - М. : Высш. шк., 2005. - 367с. - ISBN 5-06-004606-2.

2. Астафуров В.И. Строение вещества [Текст] : кн. для уч-ся / В.И. Астафуров. - 2-е изд., перераб. - М. : Просвещение, 1983. - 160 с.

3. Строение вещества. Строение кристаллов : учебное пособие / под редакцией К.Н. Мохова. — Москва : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. — 35 с. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система «Лань» : [сайт]. — URL: <https://e.lanbook.com/book/52473>

4. Михайленко, Ю.А. Строение и реакционная способность веществ : учебное пособие / Ю.А. Михайленко, К.В. Мезенцев. — Кемерово : КузГТУ имени Т.Ф. Горбачева, 2012. — 83 с. — ISBN 978-5-89070-849-6. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система «Лань» : [сайт]. — URL: <https://e.lanbook.com/book/6643>

в) Интернет-ресурсы:

1. Электронно-библиотечная система IPRbooks

2. Электронно-библиотечная система eLibrary

3. Химическая информационная сеть, МГУ им. М. В. Ломоносова [Электронный ресурс] : содержит электронные версии журналов, зарубежных и отечественных, по естественным наукам. — М., [1994-]. Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/>. — Загл. с экрана.

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU <http://elibrary.ru/>.
5. «Электронная библиотека образовательных ресурсов (ЭБОР)» <http://elib.oreluniver.ru/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лекционные занятия: комплект электронных презентаций, аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, ноутбук).

Прочее: рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет.

9. Лист дополнений и изменений

[illegible]