

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 31.08.2023 10:03:54

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Электронная структура, природа химической связи и свойства неорганических соединений

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Высокотемпературные и сверхтвердые материалы

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 3

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

38

часов на контроль

36

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	19			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	38	38	38	38
Часы на контроль	36	36	36	36
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

*кфмн, Доцент, Салимон Алексей Игоревич*

Рабочая программа

**Электронная структура, природа химической связи и свойства неорганических соединений**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ (приказ от 05.03.2020 г. № 95 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.04.01 Материаловедение и технологии материалов, 22.04.01-ММТМ-23-1.plx Высокотемпературные и сверхтвердые материалы, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.04.01 Материаловедение и технологии материалов, Высокотемпературные и сверхтвердые материалы, утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра физической химии**

Протокол от 21.06.2022 г., №11-20/21

Руководитель подразделения Салимон А.И.

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	1.1	Цель и задачи дисциплины
1.2		Цель – сформировать теоретические представления и практические навыки в использовании основных методов теории химических связей для расчетов энергии взаимодействия в гетерополярных и гомеополярных молекулах, энергии кристаллической решетки твердых тел, сил и энергии межмолекулярного взаимодействия молекул.
1.3		Задачи дисциплины:
1.4	1.	использовать методы квантовой механики и теории химической связи для анализа химической устойчивости молекул, их реакционной способности, энергии связи и энергии образования простых гомо- и гетероядерных молекул и ионных кристаллов;
1.5	2.	составлять физические модели и математические уравнения, позволяющие описывать физико-химические свойства простых гомо- и гетероядерных молекул и ионных кристаллов;
1.6	3.	осуществлять расчеты энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов из атомов и расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия.

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Высокотемпературные и сверхтвердые покрытия	
2.1.2	Жаростойкие и теплозащитные покрытия	
2.1.3	Математическое моделирование процессов и материалов	
2.1.4	Производственная практика	
2.1.5	Физико-химия получения и обработки высокотемпературных и сверхтвердых материалов	
2.1.6	Высокотемпературная прочность материалов	
2.1.7	Высокотемпературные и сверхтвердые функциональные и конструкционные материалы	
2.1.8	Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве	
2.1.9	Материаловедение и технологии перспективных материалов	
2.1.10	Порошковая металлургия высокотемпературных и сверхтвердых материалов	
2.1.11	Спектроскопические (и зондовые) методы исследования материалов	
2.1.12	Тайм-менеджмент	
2.1.13	Управление коллективами	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.2	Преддипломная практика	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

<b>ОПК-1: Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов и знаний в междисциплинарных областях</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-1-31 современную классификацию и основные типы неорганических соединений;
ОПК-1-32 электронную структуру атомов элементов;
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Знать:</b>
УК-1-32 методы математической физики для решения задач, связанных со строением не-органических и органических молекул, прогнозированием их химических и физических свойств.
УК-1-31 природу взаимосвязи между энергией связи, температурой плавления и упругими модулями

<b>ПК-1: Способен с учётом результатов исследований и контроля свойств высокотемпературных и сверхтвёрдых материалов (ВТиСТМ) на основе тугоплавких металлов, керамики, углеродных систем, их композиций, алмазов и нитрида бора (в том числе с наноструктурой) и конкретных условий их эксплуатации обосновывать и разрабатывать наиболее рациональные способы их получения с заданной структурой и составом</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-1-У1 осуществлять расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия
<b>ОПК-1: Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов и знаний в междисциплинарных областях</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-1-У1 рассчитывать энергию связи и теплоты плавления и испарения
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Уметь:</b>
УК-1-У1 анализировать и обрабатывать полученные результаты с применением программных средств и персональной компьютерной техники
<b>ПК-1: Способен с учётом результатов исследований и контроля свойств высокотемпературных и сверхтвёрдых материалов (ВТиСТМ) на основе тугоплавких металлов, керамики, углеродных систем, их композиций, алмазов и нитрида бора (в том числе с наноструктурой) и конкретных условий их эксплуатации обосновывать и разрабатывать наиболее рациональные способы их получения с заданной структурой и составом</b>
<b>Владеть:</b>
ПК-1-В1 навыками определения энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов из атомов
ПК-1-В2 навыками по применению ММО и метода Хюккеля для расчёта энергии связи в молекулах неорганических материалов.
<b>ОПК-1: Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов и знаний в междисциплинарных областях</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-1-В1 навыками построения диаграмм Эшби для анализа природы химической связи и свойств элементов и ионных кристаллов (CES EDUPack)
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Владеть:</b>
УК-1-В1 навыками построения диаграмм Эшби для анализа природы химической связи и свойств элементов и ионных кристаллов (CES EDUPack)

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	<b>Раздел 1. Ионная связь в гетерополярных молекулах и кристаллах</b>							
1.1	Введение. Типы химической связи. Электроотрицательность. Ионная связь. /Лек/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 УК-1-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3.1 Э1 Э2			
1.2	Расчет энергии связи в гетерополярной молекуле /Пр/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-У1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			

1.3	Подготовка к практическим занятиям. /Ср/	3	4	УК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
1.4	Энергия образования ионной кристаллической решетки. Уравнение Капустинского /Лек/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.5	Подготовка к практическим занятиям. /Ср/	3	4	ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
1.6	Расчет энергии связи в ионных кристаллах /Пр/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э2			
<b>Раздел 2. Ковалентная связь в гомеопольярных и гетеропольярных молекулах</b>								
2.1	Ковалентная связь. Метод валентных связей. Молекулярный ион Н2 /Лек/	3	2	УК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.2	Подготовка к практическим занятиям. /Ср/	3	4	УК-1-32 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
2.3	Расчет энергии обменного взаимодействия в молекуле водорода /Пр/	3	3	УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
2.4	Энергия молекулы Н2 Обменный и кулоновский интегралы. Симметричная и антисимметричная волновые функции /Лек/	3	2	УК-1-31 УК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э2 Э3			
2.5	Подготовка к практическим занятиям. /Ср/	3	4	УК-1-32 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2 Э3			
2.6	Расчет методом валентных связей энергии взаимодействия в гетеропольярных молекулах. Построение гибридных орбит sp, sp <sup>3</sup> . /Пр/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
2.7	Насыщенность и направленность ковалентной связи. sp-гибридизации /Лек/	3	2	УК-1-31 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
2.8	Подготовка к практическим занятиям. Подготовка к контрольной работе. /Ср/	3	14	УК-1-32 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
2.9	Расчет энергии связи σ-связи в гомеопольярных молекулах методом молекулярных орбиталей. Контрольная работа /Пр/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э2 Э3			

2.10	Метод молекулярных орбиталей (ЛКАО-МО) /Лек/	3	2	УК-1-31 УК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э3			
2.11	Подготовка к практическим занятиям. /Ср/	3	4	УК-1-32 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1			
2.12	Расчет энергии, волновых функций, порядка связи избыточного заряда, индекса свободной валентности для органических молекул /Пр/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э3			
2.13	Применение метода молекулярных орбиталей для описания свойств гомеополарных и гетерополарных молекул. /Лек/	3	2	УК-1-31 УК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2 Э3			
2.14	Подготовка к практическим занятиям. /Ср/	3	4	УК-1-32 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2			
2.15	Расчет энергии связи $\sigma$ -связи в гетерополарных молекулах методом молекулярных орбиталей. /Пр/	3	2	УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э2		КМ1	Р1
2.16	Применение метода молекулярных орбиталей для расчета свойств органических молекул. Порядок связи, индекс свободной валентности, избыточный заряд, дипольный момент /Лек/	3	2	УК-1-31 УК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э3			
	<b>Раздел 3. Межмолекулярное взаимодействие</b>							
3.1	Молекулярные силы. Энергия взаимодействия между молекулами. Водородная связь /Лек/	3	1	УК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э3			
3.2	Расчет энергии индукционного, дисперсионного и ориентационного взаимодействия между молекулами /Пр/	3	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-1-У1 ПК-1-В1 ПК-1-В2	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э3			

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

#### 5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Тест	ОПК-1-31;ОПК-1-32;УК-1-31;УК-1-32;УК-1-У1;ПК-1-У1;ПК-1-В1;ПК-1-В2	1.Что называют электроотрицательностью атома по Полингу? 1.Сумма энергии ионизации и сродства к электрону атома. 2. Сумма энергии ионизации и сродства к электрону атома деленную на электроотрицательность атома лития. 3. Сумма энергии ионизации и сродства к электрону атома деленную на электроотрицательность атома углерода. 4.Энергию отрыва электрона от ядра.

		<p>5. Энергию присоединения электрона атому.</p> <p>2. Какой из атомов в гетерополярной молекуле будет анионом?  1. Электроотрицательность которого меньше, чем другого атома  2. Потенциал ионизации которого меньше, чем другого атома  3. Электроотрицательность которого больше, чем другого атома  4. Сродство к электрону, которого меньше, чем другого атома.  5. Сродство к электрону, которого больше, чем другого атома.</p> <p>3. Какой из атомов в гетерополярной молекуле будет катионом?  1. Электроотрицательность которого меньше, чем другого атома  2. Потенциал ионизации которого меньше, чем другого атома  3. Электроотрицательность которого больше, чем другого атома  4. Сродство к электрону, которого меньше, чем другого атома.  5. Сродство к электрону, которого больше, чем другого атома.</p> <p>4. Какой из атомов в молекуле АВ будет анионом, если электроотрицательность атома А равна 2,5, а В равна 1?  1. В  2. А  3. Надо знать сродство к электрону атома А.  4. Надо знать сродство к электрону атома В.  5. Не хватает данных, чтобы ответить на вопрос.</p> <p>5. Как зависит энергия взаимодействия катиона и аниона в гетерополярной молекуле от расстояния между ними?  1. прямо пропорционально  2. обратнопропорционально  3. пропорционально квадрату расстояния между ними  4. пропорционально кубу расстояния между ними  5. обратнопропорционально квадрату расстояния между ними</p> <p>6. Какую физическую величину описывает в уравнении взаимодействия двух ионов в гетерополярной молекуле  1. Притяжение ионов.  2. Отталкивание ионов  3. Энергию взаимодействия ионов  4. Условия образования связи между ионами  5. Потенциал ионизации молекулы.</p> <p>7. Какое уравнение описывает полную энергию взаимодействия ионов в гетерополярной молекуле?  1.  2.  3.  4.  5.</p> <p>8. Какая формула используется для расчета энергии ионной решетки?  1.  2.  3.  4.  5.</p> <p>9. Что учитывает постоянная Маделунга для данного структурного типа кристалла?  1. Учитывает суммарную кулоновскую энергию по всем узлам решетки  2. Учитывает суммарную энергию притяжения ионов по всем узлам решетки  3. Учитывает суммарную энергию отталкивания ионов по всем узлам решетки  4. Жесткость кристаллической решетки.  5. Размер ионов.</p>
--	--	--

5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	ПР	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;УК-1-31;УК-1-32;УК-1-У1;УК-1-В1;ПК-1-У1;ПК-1-В1;ПК-1-В2	<p>1. Какие данные необходимо иметь, чтобы рассчитать энергию связи атомов в гетеро-полярной двухатомной молекуле?</p> <p>2. Определение электроотрицательности по Полингу?</p> <p>3. Определение потенциала ионизации.</p> <p>4. Определение сродства к электрону.</p> <p>5. Уравнение для расчета энергии в гетерополярной молекуле.</p> <p>6. Какие данные Вам понадобятся, чтобы найти постоянные, входящие в уравнения энергии связи в гетерополярной молекуле?</p> <p>7. Какой из атомов в молекуле АВ будет анионом, если электроотрицательность атома А равна 2,5, а В равна 1?</p> <p>8. Как зависит энергия взаимодействия катиона и аниона в гетерополярной молекуле от расстояния между ними?</p> <p>9. Какую физическую величину описывает в уравнении взаимодействия двух ионов в гетерополярной молекуле?</p> <p>10. Какое уравнение описывает полную энергию взаимодействия ионов в гетерополярной молекуле?</p> <p>11. Что называют электроотрицательностью атома по Полингу?</p> <p>12. Какая формула используется для расчета энергии ионной решетки?</p> <p>13. Что учитывает постоянная Маделунга для данного структурного типа кристалла?</p> <p>14. Какие величины входят в формула Капустинского для расчета теплоты образования кристаллов?</p> <p>15. Даны следующие значения величин: <math>IA = 6,2\text{эВ}</math>, <math>AB = 2,42\text{эВ}</math>, <math>r_0 = 1,9\text{А}</math>, <math>n = 9</math>. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы <math>A^+B^-</math>.</p> <p>16. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы <math>RuBr</math>, если <math>IRu = 7,2\text{эВ}</math>, <math>ArBr = 3,42\text{Дж/моль}</math>, <math>r_0 = 2,9\text{А}</math>, <math>n = 9</math>.</p> <p>17. Дана частота колебания атомов в двухатомной гетерополярной молекуле и равно-весное расстояние между атомами, как найти энергию связи атомов в этой молекуле.</p> <p>18. Даны равновесное расстояние между ядрами равно <math>2,3\text{ангстрема}</math> и <math>\epsilon = 400\text{см}^{-1}</math>. Рассчитайте энергию связи в молекуле <math>A^+B^-</math>.</p> <p>19. Какие данные понадобятся Вам, чтобы найти постоянные, входящие в уравнение для расчета энергии решетки ионного кристалла.?</p> <p>20. Используя цикл Борна-Хаберна, найдите энергию сродства электрона к атому хлора. 21. Найдите энергию решетки <math>LiCl_{тв}</math>, используя справочные данные.</p> <p>22. На основании каких физических представлений строится <math>\epsilon</math>-функция для этой молекулы в нулевом приближение метода валентных связей?</p> <p>23. Напишите гамильтониан для молекулы <math>H_2^+</math>.</p> <p>24. Методом молекулярных орбиталей найдите энергию связи в молекуле <math>H_2</math>, используя известные Вам интегралы: кулоновский, обменный и интеграл перекрытия.</p> <p>25. Что такое <math>\epsilon</math>-связь?</p> <p>26. Чем можно объяснить четырехвалентность углерода ?</p> <p>27. Почему значение угла между связями O–H в молекуле воды больше <math>90\text{градусов}</math>?</p> <p>28. Как изменяется угол между водорода атомами в молекулах <math>H_2O</math>, <math>H_2S</math>, <math>H_2Se</math> и <math>H_2Te</math>.?</p> <p>29. Как изменяется угол между водорода атомами в молекулах <math>NH_3</math>, <math>PH_3</math>, <math>AsH_3</math> и <math>SbH_3</math></p> <p>30. Какое значение углов между <math>sp^2</math>гибридными связями атомов в молекуле?</p> <p>31. Покажите, что интеграл</p> <p>32. Напишите гамильтониан для молекулы <math>H_2</math>. На основании каких физических представлений строится <math>\epsilon</math>-функция для этой молекулы в нулевом приближение в методе валентных связей?</p> <p>33. Какие основные положения метода молекулярных орбиталей Вы знаете?</p>



34. Какие допущения метода Хюккеля, которые Вы используете при расчете свойств ор-ганических молекул.
35. Запишите кулоновские интегралы, которые вводятся в ММО .
36. Какой величине равны в ММО интегралы типа  $\int \psi_i \psi_j dt$ ?
37. Какой величине равны в ММО интегралы типа  $\int \psi_i \psi_j dt$ ?
38. Чему равна полная электронная энергия молекулы?
39. С помощью какого уравнения может быть рассчитан индекс свободной (Fr) валентности атома?
40. С помощью какого уравнения может быть рассчитан порядок связи между атомами в молекуле ( $P_{ij}$ ) валентности атома?
41. С помощью какого уравнения может быть рассчитан избыточный заряд на атоме в молекуле ( $q_i$ )?
42. Как записать вековой определитель для молекулы бензола и уравнения для нахождения коэффициентов его молекулярных орбиталей.
43. Как, используя понятия о гибридизации атомных орбиталей, можно составить в ММО одноэлектронную молекулярную функцию для связи C-H в молекуле  $CH_4$ ?
44. Найдите коэффициенты для sp-гибридной орбитали.
45. Используя метод молекулярных орбиталей, рассчитайте энергию связи в молекуле  $H_2$ . Нарисуйте распределение плотности электронного облака в этой молекуле.
46. Каким образом с помощью метода ММО Хюккеля можно оценить энергию делокализации электронов в молекуле, обладающей  $\pi$ -связью, реакционную способность каждого атома, наличие дипольного момента у молекулы?.
47. Используя ММО в приближении ЛКАО, запишите вековой определитель для молекулы алилового радикала  $C_3H_5$  и найдите энергию  $\pi$ -связи, порядок связи, индекс свободной молекулы.
48. Какая из конфигураций молекулы  $H_3$  будет устойчива: линейная или треугольная?
49. Запишите вековой определитель для молекулы бутадиена в случае локализованной и делокализованной связи.
50. На основании, каких данных рассчитываются следующие величины: порядок связи между атомами в молекуле, индекс свободной валентности и избыточный заряд на атомах. Что характеризуют эти величины?
51. Найдите индекс свободной валентности атомов углерода в молекуле  $C=N-C=S$ , если известны ее молекулярные функции  $\square_1=0,12\square_1+0,31\square_2+0,49\square_3+0,78\square_4$ ,  $\square_2=0,45\square_1-0,77\square_2+0,09\square_3-0,44\square_4$   $\square_3=0,8\square_1+0,25\square_2-0,47\square_3-0,28\square_4$ ,  $\square_4=0,38\square_1+0,48\square_2+0,72\square_3+0,31\square_4$
52. Найдите порядок связи между атомами и избыточный заряд на атомах в молекуле, если известны ее молекулярные функции  $\square_1=0,52\square_1+0,52\square_2+0,5\square_3+0,61\square_4$ ,  $\square_2=0,37\square_1+0,37\square_2-0,25\square_3-0,82\square_4$   $\square_3=0,707\square_1-0,707\square_2$   $\square_4=0,33\square_1+0,33\square_2-0,83\square_3+0,56\square_4$
53. Запишите вековой определитель для молекулы  $C=N-C=O$  в случае делокализованной и локализованной связи. Исходя, из каких уравнений, можно рассчитать коэффициенты для ее молекулярных функций?
54. Напишите выражение для расчета энергии связи между молекулами за счет сил Ван-дер-Ваальса-Лондона. Как можно оценить частоту колебаний молекул в таком ассоциате.?
55. Почему в уравнение, описывающее ориентационное взаимодействие между молекулами входит температура?
56. Какое уравнение описывает усредненную энергию ориентационного взаимодействия ( $U_{ор}$ ) одинаковых молекул?
57. Какое уравнение описывает энергию индукционного взаимодействия ( $U_{инд}$ ) молекул?
58. Какое уравнение описывает энергию дисперсионного взаимодействия ( $U_{дис}$ ) одинаковых молекул?
59. Какое уравнение описывает энергию дисперсионного взаимодействия ( $U_{дис}$ ) двух разных молекул?
60. Какие характеристики молекул надо знать, чтобы рассчитать энергию связи между молекулами, используя уравнение Леннарда-Джонса?
61. Запишите потенциал Леннарда-Джонсона и объясните

			<p>физический смысл, входящих в него величин.</p> <p>62. За счет, каких сил осуществляется взаимодействие между молекулами, не имеющих дипольного момента? Какое уравнение описывает энергию дисперсионного взаимодействия (<math>U_{дис}</math>) двух разных молекул?</p> <p>63. Какое аналитическое выражение, описывающее потенциальную кривую межмолекулярного взаимодействия, называют формулой Леннарда-Джонса?</p> <p>64. Какое аналитическое выражение описывает энергию электростатического и индукционного взаимодействия между ионом и полярной молекулой?</p> <p>65. Какое аналитическое выражение описывает энергию взаимодействия между ионом и неполярной молекулой в растворе?</p> <p>66. Чем обусловлена водородная связь между молекулами?</p>
--	--	--	--

### 5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

1. На основании, каких данных можно рассчитать энергию связи атомов в гетерополярной двухатомной молекуле? Что называют электроотрицательностью по Полингу?
2. Запишите уравнение для расчета энергии в гетерополярной молекуле. На основании, каких данных можно найти постоянные, входящие в это уравнение?
3. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы  $A+B$ , если  $I_A = 6,2 \text{ эВ}$ ,  $A_B = 2,42 \text{ эВ}$ ,  $r_0 = 1,9 \text{ \AA}$ ,  $n=9$ .
4. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы  $RuBr$ , если  $I_{Ru} = 7,2 \text{ эВ}$ ,  $A_{Br} = 3,42 \text{ Дж/ моль}$ ,  $r_0 = 2,9 \text{ \AA}$ ,  $n=9$ .
5. Покажите, что, зная частоту колебания атомов в двухатомной гетерополярной молекуле и равновесное расстояние между атомами, можно найти энергию связи.
6. Рассчитайте энергию связи в молекуле  $A+B$ , если равновесное расстояние между ядрами равно  $2,3 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon = 400 \text{ см}^{-1}$ .
7. Запишите уравнение для расчета энергии решетки ионного кристалла. На основании, каких данных можно найти постоянные, входящие в это уравнение?
8. Покажите, что, используя цикл Борна-Хаберна, можно найти энергию сродства электрона к атому.
9. Покажите, как, используя экспериментальные данные, можно рассчитать энергию ионного кристалла.
10. Рассчитайте энергию решетки  $NaCl$ , если известны следующие величины: постоянная Маделунга равна  $1,75$  период решетки  $5,628 \text{ \AA}$ , от-носительная сжимаемость  $42,73 \text{ Па}^{-1}$ .
11. Напишите гамильтониан для молекулы  $H_2$ . На основании каких физических представлений строится  $\psi$ -функция для этой молекулы в нулевом приближении метода валентных связей?
12. Методом молекулярных орбиталей найдите энергию связи в молекуле  $H_2$ , используя известные Вам интегралы: кулоновский, обменный и интеграл перекрывания.
13. Напишите гамильтониан для молекулы  $H_2$ . На основании каких физических представлений строится  $\psi$ -функция для этой молекулы в нулевом приближении в методе валентных связей?
14. Сформулируйте основные положения метода молекулярных орбиталей и приближения Хюккеля для расчета свойств органических молекул.
15. Запишите вековой определитель для молекулы бензола и уравнения для нахождения коэффициентов его молекулярных орбиталей.
16. Как, используя понятия о гибридизации атомных орбиталей, можно составить в ММО одноэлектронную молекулярную функцию для связи  $C-H$  в молекуле  $CH_4$ ?
17. Как строится  $sp$ -гибридная орбиталь в методе валентных связей? На основании каких данных находят коэффициенты для такой орбитали?
18. Используя метод молекулярных орбиталей, рассчитайте энергию связи в молекуле  $H_2$ . Нарисуйте распределение плотности электронного облака в этой молекуле.
19. Каким образом с помощью метода ММО Хюккеля можно оценить энергию делокализации электронов в молекуле, обладающей  $\pi$ -связью, реакционную способность каждого атома, наличие дипольного момента у молекулы?
20. Используя ММО в приближении ЛКАО, запишите вековой определитель для молекулы алилового радикала  $C_3H_5$  и найдите энергию  $\pi$ -связи.
21. Используя метод МО, определите, какая из конфигураций молекулы  $N_3$  будет устойчива: линейная или треугольная?
22. Запишите вековой определитель для молекулы  $N_3$  различной конфигурации. Найдите уровни энергии для линейного расположения атомов в молекуле.
23. Запишите вековой определитель для молекулы бутадиена в случае локализованной и делокализованной связи.
24. На основании, каких данных рассчитываются следующие величины: порядок связи между атомами в молекуле, индекс свободной валентности и избыточный заряд на атомах. Что характеризуют эти величины?
25. Найдите индекс свободной валентности атомов углерода в молекуле  $C=N-C=S$ , если известны ее молекулярные функции  $\psi_3 = 0,12\psi_1 + 0,31\psi_2 + 0,49\psi_3 + 0,78\psi_4$ ,  $\psi_4 = 0,45\psi_1 - 0,77\psi_2 + 0,09\psi_3 - 0,44\psi_4$ ,  $\psi_2 = 0,8\psi_1 + 0,25\psi_2 - 0,47\psi_3 - 0,28\psi_4$ ,  $\psi_1 = 0,38\psi_1 + 0,48\psi_2 + 0,72\psi_3 + 0,31\psi_4$
26. Найдите порядок связи между атомами и избыточный заряд на атомах в молекуле  $C=N-C=O$ , если известны ее молекулярные функции  $\psi_1 = 0,11\psi_1 + 0,32\psi_2 + 0,5\psi_3 + 0,79\psi_4$ ,  $\psi_2 = 0,45\psi_1 + 0,77\psi_2 - 0,09\psi_3 - 0,44\psi_4$ ,  $\psi_3 = 0,8\psi_1 - 0,25\psi_2 - 0,47\psi_3 + 0,28\psi_4$ ,  $\psi_4 = 0,38\psi_1 - 0,48\psi_2 + 0,72\psi_3 - 0,31\psi_4$
27. Найдите порядок связи между атомами и избыточный заряд на атомах в молекуле, если известны ее молекулярные функции  $\psi_1 = 0,52\psi_1 + 0,52\psi_2 + 0,5\psi_3 + 0,61\psi_4$ ,  $\psi_2 = 0,37\psi_1 + 0,37\psi_2 - 0,25\psi_3 - 0,82\psi_4$ ,  $\psi_3 = 0,707\psi_1 - 0,707\psi_2$ ,  $\psi_4 = 0,33\psi_1 + 0,33\psi_2 - 0,83\psi_3 + 0,56\psi_4$
28. Запишите вековой определитель для молекулы  $C=N-C=O$  в случае делокализованной и локализованной связи. Исходя, из каких уравнений, можно рассчитать коэффициенты для ее молекулярных функций?
29. Напишите выражение для расчета энергии связи между молекулами за счет сил Ван-дер-Ваальса-Лондона. Как можно оценить частоту колебаний молекул в таком ассоциате?
30. Какие характеристики молекул надо знать, чтобы рассчитать энергию связи между молекулами, используя уравнение Леннарда-Джонса?
31. Запишите потенциал межмолекулярного взаимодействия и объясните физический смысл, входящих в него величин.
32. За счет, каких сил осуществляется взаимодействие между молекулами, не имеющих дипольного момента? Запишите это выражение.

**5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)**

Шкала оценивания ответов на теоретические вопросы

Шкала оценивания Критерии оценивания

«Отлично» Обучающийся глубоко и содержательно раскрывает ответ на каждый теоретический вопрос, не допустив ошибок. Ответ носит развернутый и исчерпывающий характер.

«Хорошо» Обучающийся в целом раскрывает теоретические вопросы, однако ответ хотя бы на один из них не носит развернутого и исчерпывающего характера.

«Удовлетворительно» Обучающийся в целом раскрывает теоретические вопросы и допускает ряд неточностей.

Обучающийся фрагментарно раскрывает содержание теоретических вопросов или их раскрывает содержательно, но допуская значительные неточности.

«Неудовлетворительно» Обучающийся не знает ответов на поставленные теоретические вопросы.

**6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ****6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Иродов И. Е.	Квантовая физика: основные законы: учебное пособие	Электронная библиотека	Москва: Лаборатория знаний, 2017
Л1.2	Белашенко Д. К., Жуховицкий А. А.	Физическая химия: Раздел: Основы квантовой механики и теории химической связи: Курс лекций	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1976

**6.1.2. Дополнительная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А.	Физическая химия: Учебник для студ. металлург. спец. вузов	Библиотека МИСиС	М.: Металлургия, 1987

**6.1.3. Методические разработки**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Белашенко Д. К., Гущина Е. И., Жуховицкий А. А.	Физическая химия: Разд.: Основы квантовой механики и теории химической связи: Метод. указания для выполнения дом. работ для студ. спец. 0643	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1982

**6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

Э1	. ИНТУИТ (национальный открытый университет)	<a href="http://www.intuit.ru">http://www.intuit.ru</a>
Э2	УНИВЕРСАРИУМ (открытая система электронного образования)	<a href="https://universarium.org">https://universarium.org</a>
Э3	CES EduPack Tutorials and FAQs	<a href="https://www.grantadesign.com">https://www.grantadesign.com</a>

**6.3 Перечень программного обеспечения**

П.1	Лицензии ПО Windows Server CAL ALNG LicSAPk MVL DvcCAL, ПО WinEDUA3 ALNG SubsVL MVL PerUsr и PerUsr
П.2	ESET NOD32 Antivirus
П.3	Win Pro 10 32-bit/64-bit

**6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных**

И.1	Каталог Российской государственной библиотеки (РГБ) [Электронный ресурс]. – <a href="http://www.aleph.rsl.ru">http://www.aleph.rsl.ru</a> (Ссылки на внешний сайт.) Ссылки на внешний сайт..
-----	--

**7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**

Ауд.	Назначение	Оснащение
А-323а	Аудитория для самостоятельной работы	комплект учебной мебели пакет на 6 рабочих мест с компьютерами, принтер, лицензионных программ MS Office
А-323а	Аудитория для самостоятельной работы	комплект учебной мебели пакет на 6 рабочих мест с компьютерами, принтер, лицензионных программ MS Office

А-323а	Аудитория для самостоятельной работы	комплект учебной мебели пакет на 6 рабочих мест с компьютерами, принтер, лицензионных программ MS Office
--------	--------------------------------------	--

### 8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Лекционные занятия нацелены на изучение студентами теоретических основ методов расчёта энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов. Практические занятия нацелены на умение решать задачи по определению энергии связи и освоению метода молекулярных орбиталей.

Предусматриваются расчетные домашние задания по различным разделам курса «Электронная структура, природа химической связи и свойства неорганических соединений». Проведение аудиторных занятий предусматривает использование в учебном курсе активных и интерактивных технологий:

- проведение лекций с использованием интерактивных и мультимедийных технологий (презентация в формате MS PowerPoint);

- при выполнении тестов предусмотрено использование специализированной компьютерной лаборатории.

Дисциплина относится к точным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Отдельные учебные вопросы выносятся на самостоятельную проработку и контролируются посредством текущей аттестации. При этом организуются групповые и индивидуальные консультации. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе, что поддерживается системой текущей и рубежной аттестации.