

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 21.09.2023 17:05:42

Уникальный идентификатор:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Квантовая химия и теория химической связи

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

28.03.03 НАНОМАТЕРИАЛЫ

Профиль

Квалификация **Бакалавр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 5

аудиторные занятия 51

самостоятельная работа 12

часов на контроль 45

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	5 (3.1)		Итого	
	18			
Неделя	18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	34	34	34	34
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	12	12	12	12
Часы на контроль	45	45	45	45
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

к.ф.-.м.н., зав.каф., Салимон А.И.

Рабочая программа

Квантовая химия и теория химической связи

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС» по направлению подготовки 28.03.03 НАНОМАТЕРИАЛЫ (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

Направление подготовки: 28.03.03 Наноматериалы, 28.03.03-БНМ-23.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

Направление подготовки: 28.03.03 Наноматериалы, , 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., №11-21/22

Руководитель подразделения Салимон Алексей Игоревич

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цели освоения дисциплины - использовать основные методы теории химических связей для расчетов энергии взаимодействия в гетерополярных и гомеополярных молекулах, энергии кристаллической решетки твердых тел, сил и энергии межмолекулярного взаимодействия молекул между собой и твердыми телами. Уметь использовать в расчетах справочную литературу о свойствах молекул и кристаллов
1.2	
1.3	Задачи:
1.4	научить
1.5	1. анализировать литературу для поиска информации об отдельных определениях, понятиях, терминах и методах, используемых в квантовой механике и теории химической связи, свойствах атомов и молекул для решения теоретических типовых задач, связанных с дальнейшим обучением и профессиональной деятельностью ...
1.6	2. использовать методы квантовой механики и теории химической связи для анализа химической устойчивости молекул, их реакционной способности, энергии связи и энергии образования в ионных
1.7	вердых тел, сил и энергии межмолекулярного взаимодействия молекул между собой и твердыми телами. Уметь использовать в расчетах справочную литературу о свойствах молекул и кристаллов

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.О
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Кристаллография	
2.1.2	Математическая статистика и анализ данных	
2.1.3	Методы математической физики	
2.1.4	Основы квантовой механики	
2.1.5	Теоретическая механика и основы теории упругости	
2.1.6	Учебная практика по получению первичных профессиональных умений	
2.1.7	Учебная практика по получению первичных профессиональных умений	
2.1.8	Физика	
2.1.9	Физическая химия	
2.1.10	Электротехника	
2.1.11	Математика	
2.1.12	Органическая химия	
2.1.13	Информатика	
2.1.14	Химия	
2.1.15	Инженерная и компьютерная графика	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Коллоидная химия	
2.2.2	Методы обработки статистических данных (анализ данных)	
2.2.3	Научно-исследовательская работа	
2.2.4	Научно-исследовательская работа	
2.2.5	Планирование и организация научно-исследовательской работы	
2.2.6	Физика конденсированного состояния	
2.2.7	Размерные эффекты в наноструктурных материалах	
2.2.8	Физико-химия наносистем	
2.2.9	Физические свойства твердых тел	
2.2.10	Методы контроля и анализа веществ	
2.2.11	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.12	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ОПК-1: Способен решать задачи профессиональной деятельности на основе применения естественнонаучных и общинженерных знаний, методов математического анализа и моделирования

Знать:

ОПК-1-32 физические и химические свойства молекул и ионных кристаллов
ОПК-1-31 теоретические модели и методы квантовой механики и теории химической связи для решения задач, связанных с описанием свойств гетероядерных и гомоядерных молекул, ионных кристаллов,
Уметь:
ОПК-1-У2 проводить расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия,
ОПК-1-У3 анализировать литературу для поиска информации об отдельных определениях, понятиях, терминах и методах, используемых в квантовой механике и теории химической связи, свойствах атомов и молекул для решения теоретических типовых задач, связанных с дальнейшим обучением и профессиональной деятельностью
УК-1: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, умение анализировать процессы и системы с использованием соответствующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов, применять системный подход для решения поставленных задач
Уметь:
УК-1-У1 осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации
ОПК-1: Способен решать задачи профессиональной деятельности на основе применения естественнонаучных и общинженерных знаний, методов математического анализа и моделирования
Уметь:
ОПК-1-У1 проводить расчеты энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов из атомов
Владеть:
ОПК-1-В1 методами расчетов энергии связи и образования молекул и ионных кристаллов из атомов

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
	Раздел 1. Квантовая химия молекул: основные принципы.							
1.1	Фотоэффект. Уравнение Эйнштейна. Фотоэлектронная спектроскопия. Эффект Комптона. Спектр атома водорода. Уравнения Бальмера и Ридберга. Теория строения атома Н. Бора. Водородоподобные атомы. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-31 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.2	Расчет энергии выхода электрона из металла, постоянной Ридберга, скорости движения электрона, энергии и радиуса орбиты для электрона, энергия ионизации атома водорода. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.3	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.4	Уравнение Луи де Бройля. Волновая функция и ее свойства. Волновые свойства микрочастиц. Квантово-механический осциллятор, жесткий ротатор, /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-31 ОПК-1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

1.5	Решения простейших задач квантовой механики: гармонический осциллятор, жесткий ротатор, /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.6	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.7	Одномерная и трехмерная потенциальные ямы. Потенциальный барьер. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-31 ОПК-1- 32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.8	Расчет вероятности нахождения частицы в различных областях потенциальной ямы, вероятности прохождения частицы через потенциальный барьер различной формы. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.9	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.10	Решение уравнения Шредингера для атомов водорода и гелия. Квантовые числа. Радиальная и угловая составляющие волновой функции. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-31 ОПК-1- 32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.11	Наиболее вероятное расстояние электрона. Расчет средних величин: среднее расстояния электрона от ядра, среднего потенциала и средней силы взаимодействия электрона с ядром. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-32 ОПК-1- У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1		КМ1	Р1
1.12	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.13	Контрольная работа по разделу «Квантовая химия» /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
	Раздел 2. Ковалентная связь.							
2.1	Метод валентных связей. Молекулярный ион H_2^+ . Волновые функции для данной молекулы. Связывающие и разрыхляющие орбитали. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.2	Расчет и построение зависимости энергии связи между ядрами в ионе молекулы водорода от расстояния между ядрами. Построение молекулярных орбиталей. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

2.3	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.4	Применение метода валентных связей для расчета энергии связи в молекуле H_2 . Волновые функции для данной молекулы. Кулоновский, резонансный интегралы и интеграл не ортогональности. Симметричная и антисимметричная волновые функции /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.5	Расчет и построение зависимости энергии связи между ядрами в молекуле водорода от расстояния между ядрами. Расчет энергии перехода электронов из основного в возбужденное состояние. Построение молекулярных орбиталей /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.6	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.7	Насыщаемость направленность связи, Гибридизация атомарных орбиталей. sp, sp ² , sp ³ Гибридизация с участием d-орбиталей. Заполнение гибридных орбиталей неподеленными парами электронов /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.8	Построение sp, sp ² , sp ³ гибридных орбиталей. Сравнение энергий связи атомов в молекуле при гибридизации при гибридизации атомарных орбиталей. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-32 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.9	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.10	Образование кратных связей; σ - и π -связи, их особенности. Делокализованные π -связи. Метод Гиллеспи. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.11	Расчет энергии делокализации π -связи. Применения метода Гиллеспи для определения геометрии молекул. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1- В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.12	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

2.13	Основные положения метода молекулярных орбиталей (ЛКАО-МО). Применение ЛКАО-МО для описания молекулы водорода. Связывающие и разрыхляющие орбитали. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-31 ОПК-1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.14	Расчет энергии обменного взаимодействия в молекуле водорода. Расчет энергии связи и молекулярных функций методом молекулярных орбиталей. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.15	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-У3 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.16	Применение метода молекулярных орбиталей для описания свойств гомеополарных молекул и гетерополарных молекул. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-31 ОПК-1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.17	Расчет энергии связи и молекулярных функций методом молекулярных орбиталей в гетерополарных молекулах. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.18	Применение метода молекулярных орбиталей для расчета свойств органических молекул. Метод Хюккеля. Молекулярные диаграммы /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-31 ОПК-1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.19	Расчет порядка связи, индекса свободной валентности, избыточного заряда и дипольного момента. Построение молекулярных диаграмм /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.20	Химическая связь в координационных соединениях /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-32 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.21	Коллоквиум по теории ковалентной связи /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
	Раздел 3. Гетерополарная связь.							
3.1	Энергия связь (ионная связь). Электроотрицательность атомов. Методы нахождения постоянных в уравнении энергии связи. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК -1-32 ОПК-1-У2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.2	Расчет константы жесткости и энергии связи в гетерополарных молекулах /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК -1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

3.3	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-У3	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.4	Ионные кристаллы. Энергия образования ионных кристаллов. Постоянная Маделунга. /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-32 ОПК-1-У2	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.5	Расчет энергии связи и энергии образования ионных кристаллов с использованием данных о сжимаемости и геометрии кристалла /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1		КМ2	Р2
3.6	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
Раздел 4. Молекулярные силы. Межмолекулярное взаимодействие								
4.1	Энергии индукционного, дисперсионного и ориентационного взаимодействия между молекулами. Потенциал Леннарда-Джонса (потенциал 6-12) /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.2	Расчет энергии индукционного, дисперсионного и ориентационного взаимодействия между молекулами. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.3	Подготовка к практическим занятиям. Решение задач /Ср/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.4	Расчет энергии адсорбционного взаимодействия молекул с адсорбентом в для различных моделей. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.5	Ион-молекулярное взаимодействие в растворах. Водородная связь /Лек/	5	1	УК-1-У1 ОПК-1-32	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.6	Контрольная работа 3. /Пр/	5	2	УК-1-У1 ОПК-1-31 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

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	Контрольная работа 1	ОПК-1-У3;ОПК-1-В1	<p>1. На основании, каких данных можно рассчитать энергию связи атомов в гетерополярной двухатомной молекуле? Что называют электроотрицательностью по Полингу?</p> <p>2. Как, используя понятия электроотрицательности, определить какой из двух атомов в гетероядерной молекуле будет катионом или анионом? Ответ обоснуйте.</p> <p>3. Запишите уравнение для расчета энергии в гетерополярной молекуле. На основании, каких данных можно найти постоянные, входящие в это уравнение?</p> <p>4. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы $A+B^-$, если $I_A = 6,2 \text{ эВ}$, $A_B = 2,42 \text{ эВ}$, $r_0 = 1,9 \text{ \AA}$, $n=9$.</p> <p>5. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы $RuBr$, если $I_{Ru} = 7,2 \text{ эВ}$, $A_{Br} = 3,42 \text{ Дж/ моль}$, $r_0 = 2,9 \text{ \AA}$, $n=9$.</p> <p>6. Покажите, что, зная частоту колебания атомов в двухатомной гетерополярной молекуле и равновесное расстояние между атомами, можно найти энергию связи.</p> <p>7. Дайте определения потенциалу ионизации, сродству к электрону и электроотрицательности атома.</p> <p>8. Рассчитайте энергию связи в молекуле $A+B^-$, если равновесное расстояние между ядрами равно $2,3 \text{ \AA}$, $\epsilon = 400 \text{ см}^{-1}$.</p> <p>9. Запишите уравнение для расчета энергии решетки ионного кристалла. На основании, каких данных можно найти постоянные, входящие в это уравнение?</p>
КМ2	Контрольная работа 2	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1	<p>10. Покажите, что, используя цикл Борна-Хаберна, можно найти энергию сродства электрона к атому.</p> <p>11. Покажите, как, используя экспериментальные данные, можно рассчитать энергию ионного кристалла.</p> <p>12. Рассчитайте энергию решетки $NaCl$тв, если известны следующие величины: постоянная Маделунга равна $1,75$ период решетки $5,628 \text{ \AA}$, относительная сжимаемость $42,73 \text{ Па}^{-1}$.</p> <p>13. Напишите гамильтониан для молекулы H_2^+. На основании каких физических представлений строится ψ-функция для этой молекулы в нулевом приближение метода валентных связей?</p>
КМ3	Контрольная работа 3	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;УК-1-У1	<p>14. Сформулируйте основные положения теории валентных связей.</p> <p>15. Методом валентных связей найдите энергию связи в молекуле H_2, используя известные Вам интегралы: кулоновский, обменный и интеграл перекрытия.</p> <p>16. Запишите выражение для кулоновского интеграла в случае молекулы водорода. Объясните физический смысл всех членов в этом интеграле.</p> <p>17. Напишите гамильтониан для молекулы H_2. На основании каких физических представлений строится ψ-функция для этой молекулы в нулевом приближение в методе валентных связей?</p> <p>18. Как, используя понятия о гибридизации атомных орбиталей, можно составить в ММО одноэлектронную молекулярную функцию для связи $C-N$ в молекуле CH_4?</p> <p>19. Как строится sp-гибридная орбиталь? На основании каких данных находят коэффициенты для такой орбитали?</p> <p>20. Найдите коэффициенты для ψ-функции sp-гибридной орбитали.</p> <p>21. Объясните, почему у молекулы воды и сероводорода угол между σ-связями имеет разное значение. У какой аналогичной молекулы он близок к теоретическому?</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
Р1	Контрольная работа 1	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1	Теоретические и практические задачи
Р2	Контрольная работа 2	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1	теоретические и практические задачи
Р3	Контрольная работа 3	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;УК-1-У1	теоретические и практические задачи

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 $5,628 \text{ \AA}$, относительная сжимаемость $42,73 \text{ Па}^{-1}$.
11. Напишите гамильтониан для молекулы H_2 . На основании каких физических представлений строится \square -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 перекрытия.
13. Напишите гамильтониан для молекулы H_2 . На основании каких физических представлений строится \square -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 $C-N$ 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 \square -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 π -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 $\square_3 = 0,12\square_1 + 0,31\square_2 + 0,49\square_3 + 0,78\square_4$, $\square_4 = 0,45\square_1 - 0,77\square_2 + 0,09\square_3 - 0,44\square_4$, $\square_2 = 0,8\square_1 + 0,25\square_2 - 0,47\square_3 - 0,28\square_4$, $\square_1 = 0,38\square_1 + 0,48\square_2 + 0,72\square_3 + 0,31\square_4$
26. Найдите порядок связи между атомами и избыточный заряд на атомах в молекуле $C=N-C=O$, если известны ее молекулярные функции $\square_1 = 0,11\square_1 + 0,32\square_2 + 0,5\square_3 + 0,79\square_4$, $\square_2 = 0,45\square_1 + 0,77\square_2 - 0,09\square_3 - 0,44\square_4$, $\square_3 = 0,8\square_1 - 0,25\square_2 - 0,47\square_3 + 0,28\square_4$, $\square_4 = 0,38\square_1 - 0,48\square_2 + 0,72\square_3 - 0,31\square_4$
27. Найдите порядок связи между атомами и избыточный заряд на атомах в молекуле, если известны ее молекулярные функции $\square_1 = 0,52\square_1 + 0,52\square_2 + 0,5\square_3 + 0,61\square_4$, $\square_2 = 0,37\square_1 + 0,37\square_2 - 0,25\square_3 - 0,82\square_4$, $\square_3 = 0,707\square_1 - 0,707\square_2$, $\square_4 = 0,33\square_1 + 0,33\square_2 - 0,83\square_3 + 0,56\square_4$
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.

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

Оценка «отлично» или «хорошо» ставится, если студент полно излагает изученный материал, обнаруживает понимание специфики вопроса, дает правильное определение основных понятий речевой коммуникации; обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры, самостоятельно составленные; излагает материал последовательно и правильно с точки зрения норм литературного языка; владеет навыками языкового анализа. Ответ не содержит фактические ошибки.

Оценка «удовлетворительно» ставится, если студент дает ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, т.е. обнаруживает понимание специфики вопроса, но при ответе не демонстрирует достаточной обоснованности суждений, и/или отчасти подменяет рассуждения пересказом текста, и/или допускает одну фактическую ошибку.

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если студент обнаруживает незнание большей части материала, неверно отвечает на вопрос, даёт ответ, который содержательно не соотносится с поставленной задачей, допускает ошибки в формулировке определений и правил, искажающие их смысл, беспорядочно излагает материал.

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.	Задачи по квантовой физике	Электронная библиотека	Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015
Л1.2	Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А.	Физическая химия: Учебник для студ. металлург. спец. вузов	Библиотека МИСиС	М.: Металлургия, 1987

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Крашенинин В. И., Газенаур Е. Г., Кузьмина Л. В.	Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012

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	Каталог Российской государственной библиотеки (РГБ) [Электронный ресурс].	– http://www.aleph.rsl.ru (Ссылки на внешний сайт.) Ссылки на внешний сайт..
----	---	---

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	Научная электронная библиотека eLIBRARY https://elibrary.ru/
-----	---

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПКс доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
Любой корпус Учебная аудитория	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	доска, комплект учебной мебели на 30 посадочных мест

Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.
----------------------	--	--

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Обучение организуется в соответствии с настоящей программой. При самостоятельной работе можно использовать электронную версию конспекта.

Освоение каждого раздела курса необходимо начинать с изучения лекционного материала: конспекта лекции, рекомендуемой литературы. Критерием успешного освоения лекционного материала для каждого студента могут служить результаты самоконтроля. Если студент оказывается способным справиться с большинством предлагаемых в каждом разделе дисциплины контрольных вопросов, тестов и задач, значит, процесс освоения материала идет успешно.