

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 25.09.2023 15:15:35

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)

Теория химической связи

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

03.03.02 ФИЗИКА

Профиль

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 7

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

38

часов на контроль

36

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
	18			
Неделя	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):

дхн, Профессор, Астахов Михаил Васильевич

Рабочая программа

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 03.03.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.03.02 ФИЗИКА, 03.03.02-БФ3-23.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.03.02 ФИЗИКА, , 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 А.И.

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	Задачи: научить
1.3	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;
1.4	2. использовать методы квантовой механики и теории химической связи для анализа химической устойчивости молекул, их реакционной способности, энергии связи и энергии образования.

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.06
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Анализ данных	
2.1.2	Высшая математика. Спецглавы.	
2.1.3	Квантовая механика	
2.1.4	Машинное обучение	
2.1.5	Методы исследования материалов	
2.1.6	Методы обработки статистических данных (анализ данных)	
2.1.7	Метрология, стандартизация и технические измерения	
2.1.8	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.9	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.10	Фазовые равновесия и структурообразование	
2.1.11	Физика поверхности	
2.1.12	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы	
2.1.13	Линейная алгебра	
2.1.14	Методы контроля и анализа веществ	
2.1.15	Теория поверхностных явлений	
2.1.16	Теория функций комплексных переменных	
2.1.17	Техника физико-химического эксперимента	
2.1.18	Электродинамика	
2.1.19	Кристаллография	
2.1.20	Математическая статистика и анализ данных	
2.1.21	Методы математической физики	
2.1.22	Теоретическая механика и основы теории упругости.	
2.1.23	Физика	
2.1.24	Электротехника	
2.1.25	Математика	
2.1.26	Органическая химия	
2.1.27	Информатика	
2.1.28	Химия	
2.1.29	Инженерная и компьютерная графика	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Квантовые вычисления	
2.2.2	Методы вычислительной физики	
2.2.3	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.4	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.5	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.6	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.7	Статистические расчеты равновесий	
2.2.8	Теоретическая нанофотоника	

2.2.9	Термодинамика неравновесных процессов
2.2.10	Термодинамика сложных систем
2.2.11	Физика низкоразмерных систем
2.2.12	Фотоника

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ОПК-1: Способен применять базовые знания в области физико-математических и (или) естественных наук в сфере своей профессиональной деятельности, осуществлять моделирование и анализ для проведения детальных исследований и поиска решения технических вопросов в соответствующей области исследования

Знать:

ОПК-1-32 физические и химические свойства молекул и ионных кристаллов

ОПК-1-31 физические модели и математические уравнения, позволяющие описывать физико-химические свойства простых гомо- и гетероядерных молекул и ионных кристаллов

ПК-3: Способен осуществлять проведения работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований

Уметь:

ПК-3-У1 осуществлять проведения работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований

ПК-4: Способен решать задачи физики используя современные методы исследования и математические методы решения задач

Уметь:

ПК-4-У1 решать задачи физики используя современные методы исследования и математические методы решения задач

ОПК-1: Способен применять базовые знания в области физико-математических и (или) естественных наук в сфере своей профессиональной деятельности, осуществлять моделирование и анализ для проведения детальных исследований и поиска решения технических вопросов в соответствующей области исследования

Уметь:

ОПК-1-У1 проводить расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия

Владеть:

ОПК-1-В1 информационными средствами и технологиями, в т.ч. для проведения теоретических расчетов и визуализации результатов

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. Ионная связь в гетерополярных молекулах и кристаллах							
1.1	Введение. Типы химической связи. Энергия связи в гетерополярной молекуле. Электроотрицательность /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК-3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
1.2	Расчет энергии связи в гетерополярной молекуле /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК-3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			

1.3	Энергии связи в ионных кристаллах. Энергия образования ионной кристаллической решетки. Уравнение Капустинского /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
1.4	Расчет энергии связи в ионных кристаллах. /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
1.5	Энергия образования ионной кристаллической решетки /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
1.6	Выполнение расчетных задач /Ср/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
1.7	Контрольная работа. Энергия связи /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
	Раздел 2. Ковалентная связь в гомеоплярных и гетероплярных молекулах							
2.1	Ковалентная связь. Метод валентных связей. Молекулярный ион H_2^+ /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.2	Выполнение расчетных задач /Ср/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.3	Расчет энергии связи в молекуле H_2^+ /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.4	Метод валентных связей. Молекула H_2 . Энергия связи в молекуле H_2 Обменный и кулоновский интегралы. Симметричная и антисимметричная волновые функции /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.5	Выполнение расчетных задач /Ср/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.6	Расчет энергии обменного взаимодействия в молекуле водорода /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1		КМ1	

2.7	Направленность ковалентной связи. Гибридизация атомарных орбиталей /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.8	Выполнение расчетных задач /Ср/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.9	Расчет методом валентных связей энергии взаимодействия в гетерополярных молекулах. Построение гибридных орбит sp , sp^3 . /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.10	Метод молекулярных орбиталей (ЛКАО-МО) Применение метода молекулярных орбиталей для описания свойств гомеополярных молекул /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.11	Выполнение расчетных задач. Подготовка к контрольной работе /Ср/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.12	Расчет энергии связи σ -связи в гомеополярных молекулах методом молекулярных орбиталей /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.13	Метод ММО Хюккеля, энергия делокализации электронов в молекуле, обладающей π -связью /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.14	Расчет энергии связи σ -связи в гетерополярных молекулах методом молекулярных орбиталей. /Пр/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.15	Выполнение расчетных задач. Подготовка к выполнению домашнего задания и контрольной работе. /Ср/	7	10	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.16	Порядок связи, индекс свободной валентности, избыточный заряд, дипольный момент. Построение молекулярных диаграмм /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
2.17	Контрольная работа /Пр/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л2.1Л3.1 Э1			
2.18	Выполнение расчетных задач /Ср/	7	10	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			

	Раздел 3. Межмолекулярное взаимодействие							
3.1	Молекулярные силы. Энергия взаимодействия между молекулами /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
3.2	Расчет энергии индукционного, дисперсионного и ориентационного взаимодействия между молекулами /Пр/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
3.3	Энергия вандерваальсово взаимодействие между двумя макромолекулами /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
3.4	Выполнение расчетных задач /Ср/	7	13	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
3.5	Водородная связь. Ионно-молекулярное взаимодействие /Лек/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1			
3.6	Водородная связь. Ионно-молекулярное взаимодействие /Пр/	7	1	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ПК -3-У1 ПК-4-У1	Л1.1Л2.1Л3. 1 Э1		КМ2	Р1

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-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-В1;ОПК-1-У1;ПК-3-У1;ПК-4-У1	<ol style="list-style-type: none"> 1. На основании, каких данных можно рассчитать энергию связи атомов в гетерополярной двухатомной молекуле? Что называют электроотрицательностью по Полингу? 2. Как, используя понятия электроотрицательности, определить какой из двух атомов в гетероядерной молекуле будет катионом или анионом? Ответ обоснуйте. 3. Запишите уравнение для расчета энергии в гетерополярной молекуле. На основании, каких данных можно найти постоянные, входящие в это уравнение? 4. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы $A+B^-$, если $I_A = 6,2 \text{ эВ}$, $A_B = 2,42 \text{ эВ}$, $r_0 = 1,9 \text{ \AA}$, $n=9$. 5. Рассчитайте энергию образования из атомов молекулы $RuBr$, если $I_{Ru} = 7,2 \text{ эВ}$, $A_{Br} = 3,42 \text{ Дж/ моль}$, $r_0 = 2,9 \text{ \AA}$, $n=9$. 6. Покажите, что, зная частоту колебания атомов в двухатомной гетерополярной молекуле и равновесное расстояние между атомами, можно найти энергию связи. 7. Дайте определения потенциалу ионизации, сродству к электрону и электроотрицательности атома. 8. Рассчитайте энергию связи в молекуле $A+B^-$, если равновесное расстояние между ядрами равно $2,3 \text{ \AA}$, $\epsilon = 400 \text{ см}^{-1}$. 9. Запишите уравнение для расчета энергии решетки ионного кристалла. На основании, каких данных можно найти постоянные, входящие в это уравнение? 10. Покажите, что, используя цикл Борна-Хаберна, можно найти энергию сродства электрона к атому. 11. Покажите, как, используя экспериментальные данные, можно рассчитать энергию ионного кристалла. 12. Рассчитайте энергию решетки $NaCl$, если известны следующие величины: постоянная Маделунга равна $1,75$ период решетки $5,628 \text{ \AA}$, относительная сжимаемость $42,73 \text{ Па}^{-1}$.
КМ2	Контрольная работа 2	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-3-У1;ПК-4-У1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Напишите гамильтониан для молекулы H_2. На основании каких физических представлений строится ψ-функция для этой молекулы в нулевом приближении метода валентных связей? 2. Сформулируйте основные положения теории валентных связей. 3. Методом валентных связей найдите энергию связи в молекуле H_2, используя известные Вам интегралы: кулоновский, обменный и интеграл перекрытия. 4. Запишите выражение для кулоновского интеграла в случае молекулы водорода. Объясните физический смысл всех членов в этом интеграле. 5. Напишите гамильтониан для молекулы H_2. На основании каких физических представлений строится ψ-функция для этой молекулы в нулевом приближении в методе валентных связей? 6. Как, используя понятия о гибридизации атомных орбиталей, можно составить в ММО одноэлектронную молекулярную функцию для связи $C-H$ в молекуле CH_4? 7. Как строится sp-гибридная орбиталь? На основании каких данных находят коэффициенты для такой орбитали? 8. Найдите коэффициенты для ψ-функции sp-гибридной орбитали. 9. Объясните, почему у молекулы воды и сероводорода угол между σ-связями имеет разное значение. У какой аналогичной молекулы он близок к теоретическому? 10. Покажите, что sp-гибридизация приводит к направленной в пространстве σ-связи.
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	Реферат	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-3-У1;ПК-4-У1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Молекулярные силы. 2. Энергия взаимодействия между молекулами. 3. Метод валентных связей. 4. Молекула H_2. 5. Энергия связи в молекуле H_2 6. Обменный и кулоновский интегралы. 7. Симметричная и антисимметричная волновые функции

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 ψ -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 ψ -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 π -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 H_3 будет устойчива: линейная или треугольная?
22. Запишите вековой определитель для молекулы H_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. За счет, каких сил осуществляется взаимодействие между молекулами, не имеющих дипольного момента? Запишите это выражение

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

Оценка «отлично» - обучающийся показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно применяет полученные знания на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу.

Оценка «хорошо» - обучающийся показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, четко излагает материал.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляет их после дополнительных и наводящих вопросов.

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания для решения простых задач, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «не явка» – обучающийся на экзамен не явился.

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

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

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 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

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

Лекционные занятия посвящены рассмотрению ключевых, базовых положений курса и разъяснению учебных заданий, выносимых на самостоятельную проработку. Практические занятия проводятся для закрепления усвоенной информации, приобретения навыков ее применения для решения практических задач в предметной области дисциплины.

Предусматриваются: расчетное домашнее задание, контрольные работы.

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 домашних заданий 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. Самостоятельная работа предусматривает не только проработку материалов лекционного курса, но и их расширение в результате поиска, анализа, структурирования и представления в компактном виде современной информации из всех возможных источников. При этом организуются групповые и индивиду-альные консультации. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе, что поддерживается системой текущей и рубежной аттестации.