

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет
Кафедра физической химии

УТВЕРЖДАЮ:

проректор по научно-методической
и учебной работе

« 22 » апреля



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА»

Специальность: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Образовательная программа: специалитет

Квалификация: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения:
очная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

А.В. Белый

« 16 » апреля 2020 г.

Программа составлена на основе Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652; учебного плана и основной образовательной программы специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
к.х.н., доцент

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии

Протокол №13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Учебная дисциплина «Строение вещества» входит в *вариативную часть профессионального блока дисциплин* (ПБ.ВВ.4), подготовки студентов ОП Специалитет по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия. Дисциплина «Строение вещества» реализуется на химическом факультете ДонНУ кафедрой физической химии; основывается на базе дисциплин государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия - неорганическая, органическая, физическая и квантовая химия, является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Специальность	04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»	
Специализация		
Образовательная программа	специалитет	
Квалификация	<i>Химик. Преподаватель химии</i>	
Количество содержательных модулей	3	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	<i>Вариативная часть ПБ</i>	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	МК, экзамен	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	5	
Год подготовки	3	
Семестр	6	
Количество часов	180	
- лекционных	54	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	36	
- самостоятельной работы	90	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,	10	
в т.ч. аудиторных	5	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели:

- *педагогическая* – формирование у студентов панорамы знаний о атомно-молекулярной архитектуре и электронной структуре химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях, подготовка специалистов-химиков, которые умеют применять возможности современной структурной химии для решения текущих химических проблем;
- *дидактическая* – усвоение знаний, предусмотренных программой, благодаря целенаправленному сотрудничеству преподавателя и студента;
- *методическая* – выделить главное звено в каждой теме, что будет способствовать формированию основных понятий по курсу, формированию знаний в результате активиза-

ции познавательной деятельности студентов, применение различных методов активного обучения.

Задачи:

1. раскрыть закономерности атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры молекулярного и супрамолекулярного уровня организации вещества; подготовить специалиста - химика, который, опираясь на основные концепции атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры химических соединений сможет объяснить их свойства.
2. выделить методологически важные вопросы химии и на конкретных примерах показать взаимосвязь строения вещества на молекулярном и супрамолекулярном уровнях с его свойствами.
3. развитие умений, которые помогут грамотно применять методы современные технологии структурной химии при решении различных задач,
4. дать в руки будущим специалистам-экспериментаторам инструмент, который позволил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий квантовой химии при решении типичного цикла задач: расчеты геометрических характеристик молекул; построение карт распределения электронной плотности вдоль разных сечений в пространстве молекулы; расчеты дипольных моментов и энергий ионизации молекул; расчеты поверхности потенциальной энергии химических реакций.

Требования к результатам освоения дисциплины. Процесс изучения дисциплины «Строение вещества» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия:

а) универсальных компетенций (УК):

системное и критическое мышление

– способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);

разработка и реализация проектов

– способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла (УК-2);

коммуникация

– способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия (УК-4);

самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)

– способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки и образования в течение всей жизни (УК-6).

безопасность жизнедеятельности

– способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций (УК-8).

б) общепрофессиональных компетенций (ОПК):

общепрофессиональные навыки

– способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетнотеоретических работ химической направленности (ОПК-1);

– способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности (ОПК-2);

– способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения (ОПК-3).

физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности

- способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач (ОПК-4);
- способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-5);

представление результатов профессиональной деятельности

- способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе (ОПК-6).

в) профессиональные компетенции (ПК):

научно-исследовательская деятельность:

- способен проводить сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований в различных областях химии, химической технологии и смежных наук (ПК-1);
- способен оформлять результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (ПК-2);
- способен внедрять результаты исследований и разработок в соответствии с установленными полномочиями (ПК-3);

технологическая деятельность:

- способен проводить научные исследования, совершенствовать и разрабатывать теории и методы изучения химических процессов, осуществлять практическое применение полученных знаний и результатов в различных отраслях экономики (промышленности, сельском хозяйстве и др.), связанных с переработкой сырья, полуфабрикатов, промышленных отходов, получением и совершенствованием различных веществ, материалов, разработкой и улучшением технологических процессов (ПК-4);
- способен к проведению опытов, испытаний и анализов с целью изучения состава, строения, свойств и процессов превращений веществ, энергетических и химических изменений в различных натуральных или искусственных веществах, сырье и изделиях (ПК-5);
- способен на разработку методик проведения контроля качества для изготовителей и потребителей химической продукции (ПК-6).

организационно-управленческая деятельность:

- способен осуществлять научное руководство работами в соответствии с планом работы структурного подразделения, формировать их конечные цели и предполагаемые результаты (ПК-7);
- способен осуществлять контроль выполнения предусмотренных планом заданий, контроль качества проведения работ, выполненных работниками подразделения и соисполнителями (ПК-8);
- способен применять актуальную нормативную документацию в соответствующей области знаний (ПК-9).

педагогическая деятельность:

- способен осуществлять профессиональную деятельность в соответствии с требованиями федеральных государственных образовательных стандартов, к разработке, изменению и обеспечению выполнения учебных программ в соответствии с учебным планом и графиком учебного процесса (ПК-10);
- способен использовать разнообразные эффективные формы, приемы и методы обучения, в том числе, выходящие за рамки учебных занятий: проектная деятельность, лабораторные эксперименты, полевая практика и т.п., к проведению индивидуальных занятий с обучающимися, организацию и контроль их самостоятельной работы (ПК-11);

- способен разрабатывать (осваивать) и применять современные психолого-педагогические технологии, основанные на знании законов развития личности и поведения в реальной и виртуальной среде (ПК-12).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен

знать:

- основные положения классической и квантовой теории строения вещества;
- основные понятия атомно-молекулярной архитектуры химических соединений.
- ключевые концепции структурной химии;
- закономерности связи электронного строения химических соединений с их свойствами и реакционной способностью.

уметь:

- получать структурно-химическую информацию молекулярных объектов методами молекулярного моделирования;
- определить равновесную структуру;
- провести конформационный анализ;
- рассчитать энергию ионизации в вертикальном и адиабатическом приближении, а также по теореме Купманса;
- рассчитать энергию диссоциации химических соединений на ионы или радикалы;
- рассчитать дипольные моменты и использовать их для обоснования результатов конформационного анализа;
- анализировать полученные результаты, опираясь на знания концепций структурной химии;
- использовать программы структурной химии для решения химических задач;
- осуществить поиск необходимых физико-химических данных в электронных источниках научной химической информации;
- применять свои знания на практике и владеть навыками работы на современных компьютерных системах;
- творчески подходить к решению задачи;
- проводить поиск структурной информации в современных электронных ресурсах;
- провести и обосновать выбор метода структурной химии, который необходим для решения поставленной задачи;
- ориентироваться в круге основных проблем современной структурной химии.

владеть:

- методами исследования структурной химии для решения конкретных химических проблем;
- навыками применения основных положений квантовой химии для анализа свойств химических соединений;
- навыками применения основных положений структурной химии для анализа свойств химических соединений;
- методологией квантово-химического определения прочности химической связи;
- методологией квантово-химического определения параметров электронодонорных и электроноакцепторных свойств химических соединений;
- методологией квантово-химического определения дипольных моментов химических соединений;
- методологией квантово-химического определения энергии электронных переходов из основного в возбужденное электронное состояние химических соединений;
- методологией квантово-химического прогноза направления протекания химической реакции;

- методологией анализа результатов молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- методологией расчета квантово-химических индексов реакционной способности химических частиц вещества;
- методологией квантово-химической оценки кинетических и активационных параметров химической реакций.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<i>Содержательный модуль 1</i>	
Тема 1. Молекулярная структура вещества	Молекулярная структура химических частиц вещества. Топологическая и геометрическая модель молекулярной структуры вещества. Статическая и динамическая модель молекулярной структуры вещества. L, T, I - модель молекулярной структуры конденсированной фазы вещества. Влияние агрегатного состояния на молекулярную структуру химических частиц вещества. Стереохимическое описание молекулярной структуры. Параметры молекулярной структуры, внутренние координаты химических частиц вещества..
Тема 2. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества методом рентгеноструктурного анализа. r – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. r' – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. r, U – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. r, ρ – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества методом электронографии. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества методом нейтронографии. Эффекты влияния кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества понижение молекулярной симметрии: конформационная неэквивалентность молекул. конформационный полиморфизм молекул. Операционные эффекты дифракционных методов определения молекулярной структуры.
Тема 3. Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	Спектроскопия и спектроструктурная информация. Энергия фотона. Образование и дезактивация электронно-возбужденного состояния химических частиц (диаграмма Яблонского). Спиновая мультиплетность химических частиц в основном, возбужденном и триплетном электронном состоянии. Спиновая мультиплетность ионов. Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов, катионов и анионов. Энергия перехода из

	основного в возбужденное электронное (колебательное и вращательное) состояние. Диаграмма Яблонского. Внутренняя конверсия. Интеркомбинационная конверсия. Фосфоресценция. Флюоресценция. Молекулярная и спиновая спектроскопия. Необходимое условие появления полосы в спектре химической частицы. Достаточное условие появления полосы в спектре химической частицы. Следствия действия радиоволнового, микроволнового, инфракрасного, ультрафиолетового, рентгеновского электромагнитного излучения на молекулярную структуру. Информационно-поисковые спектроструктурные системы. Экспертные спектроструктурные системы. Безэталонный спектроструктурный анализ. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
Тема 4. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	Поверхность потенциальной энергии и равновесная молекулярная структура химических частиц вещества. Условия и процедура определения равновесного состояния химических частиц вещества. Алгоритмы оптимизации молекулярной структуры химических частиц вещества. Теорема вириала для равновесного состояния химических частиц. Получить аналитическое выражение теоремы вириала для равновесного состояния химических соединений. Соотношение кинетической и полной энергии в равновесном состоянии химических соединений. Соотношение потенциальной и полной энергии в равновесном состоянии химических соединений. Методология установления равновесной структуры молекул
Содержательный модуль 2	
Тема 5. Методология конформационного анализа химических соединений.	Понятие конформационного анализа химических соединений. Определение числа конформеров на ППЭ. Энергетические барьеры конформационных переходов. Скорость конформационных переходов. Описание состава равновесной смеси конформеров. Определение состава смеси конформеров методами молекулярной спектроскопии. Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов. Определение состава смеси конформеров методом теоретического конформационного анализа.
Тема 6. Структурная поляризация химических соединений	Представление о природе постоянного электрического дипольного момента химических частиц вещества. Индуцированная молекулярная поляризация. Представление о природе индуцированного дипольного момента химических частиц вещества. Представление о природе мгновенного дипольного момента химических частиц вещества. Поляризуемость химических частиц вещества. Надполяризуемость химических частиц вещества. Молярная поляризация вещества. Уравнение Клаузиуса - Моссоти. Электронная поляризация вещества. Уравнение Лорентца - Лоренца. Атомная поляризация вещества. Ориентационная поляризация веще-

	ства. Уравнение Дебая. Определение дипольных моментов химических частиц вещества методом Дебая. Определение точечного (зарядового) и гибридного (орбитального) дипольного момента химических частиц вещества методами квантовой химии.
<p>Тема 7. Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества</p>	Потенциалы ионизации химических частиц вещества. Сродство к электрону химических частиц вещества. Вертикальная ионизация химических частиц. Адиабатическая ионизация химических частиц. Вертикальный потенциал ионизации. Вертикальное сродство к электрону. Принцип Франко-Кондона. Адиабатический потенциал ионизации. Адиабатическое сродство к электрону. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии. Определение энергии ионизации химических частиц в приближении замороженных орбиталей. Определение потенциалов ионизации химических частиц в приближении замороженных орбиталей. Определение сродства к электрону химических частиц в приближении замороженных орбиталей. Определение энергии вертикальной ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение вертикальных потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение вертикального сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии. Определение энергии адиабатической ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение адиабатических потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение адиабатического сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии.
<p>Тема 8. Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.</p>	Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи. Концепция валентности в теории химической связи. Электронно-ионная концепция теории химической связи. Классическая электронная концепция в теории химической связи. Орбитально-зарядовая концепция в теории химической связи. Принцип орбитального соответствия в теории химической связи. Связывающие и антисвязывающие комбинации s – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие σ -комбинации p – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие π -комбинации p – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие комбинации s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В. Энергия двухатомных взаимодействий (E_{AB}) в приближении Малликена. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий. Энергия йонных двухатомных взаимодействий. Энергия диссоциации химических соединений. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно-электронных взаимодействий в молекулах. Теорема

	Гельмана-Фейнмана. Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана. Теорема вириала и химическая связь
Содержательный модуль 3	
Тема 9. Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества. Природа Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий химических частиц вещества. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Водородная связь. Ассоциаты янус-молекул Энергия Н – связи. Профили ППЭ Н – ассоциатов. Длина Н – связи. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов. Изменение длины связи $\sim X-H \dots$ в Н-ассоциатах. Конфигурация фрагмента $\sim X-H \dots Y$ в Н-ассоциатах. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах. ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов. Дипольный момент Н-ассоциатов. Ион-ионные взаимодействия. Ион-дипольные взаимодействия. Катион- π -взаимодействия. π - π -Стэкинг- взаимодействия. Гидрофобные взаимодействия.
Тема 10. Концепция молекулярного распознавания химических частиц вещества на уровне их взаимодействия.	Супрамолекулярная самосборка. Спонтанная ассоциация. Самоорганизация. Молекулярное распознавание химических частиц вещества в процессе супрамолекулярных взаимодействий. Молекулярная информация химических частиц вещества. Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов. Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов. Молекулярный докинг химических частиц вещества на уровне их взаимодействий. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества. Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества. Темплатный эффект. Кинетический темплатный эффект. Термодинамический темплатный эффект. Комплементарность молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия... Принцип двойной комплементарности молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия. Динамическая комплементарность молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия.
Тема 11. QSAR и QSPR компьютерные технологии структурной химии	Метод, методика и методология научных исследований в химии. QSAR и QSPR - установление зависимостей между структурой и свойствами химических частиц вещества. Прямая и обратная задачи QSAR и QSPR. QSAR и QSPR методология установление зависимостей между структурой и свойствами химических частиц вещества. Дескрипторы молекулярной структуры:

	Классификация дескрипторов молекулярной структуры QSAR/QSPR. Дескрипторы молекулярной структуры элементного уровня. Топологические дескрипторы молекулярной структуры. Матрица смежности и топологический дескриптор полной смежности. Матрица межатомных расстояний и топологический дескриптор Винера. Топологический индекс Рандича. Топологические индексы теоретико-информационного типа HyperChem генератор дескрипторов молекулярной структур
Тема 11. Методология молекулярной механики	Модель и энергия химических частиц в приближении молекулярной механики. Потенциал линейной деформации химических связей в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциал деформации валентных угловых молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциал внутреннего обращения молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциалы невалентных взаимодействий (Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий) в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциалы электростатических взаимодействий в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциал Н-связи в приближении молекулярной механики химических частиц. MM+ силовое поле молекулярной механики. AMBER силовое поле молекулярной механики. BIO+ силовое поле молекулярной механики. OPLS силовое поле молекулярной механики. Hyper Chem молекулярная механика.
Тема 13. Вычислительный эксперимент в структурной химии	Общие принципы вычислительного эксперимента в структурной химии. Схема технологического цикла вычислительного эксперимента. Свойства моделей «белый ящик», «черный ящик» и «серый ящик».

Тематический план

	Содержательный модуль 1											
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов											
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения					
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. Молекулярная структура вещества	9	3		2	4							

Тема 2. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	18	6		2	10							
Тема 3. Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	18	6		4	8							
Тема 4. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	15	3		4	8							
Итого по содержательному модулю 1	60	18	-	12	30							

Названия содержательных модулей и тем	Содержательный модуль 2											
	Количество часов											
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения на базе общего среднего образования					
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 5. Методология конформационного анализа химических соединений.	16	5		4	7							
Тема 6. Структурная поляризация химических соединений	12	3		2	7							
Тема 7. Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	16	5		4	7							
Тема 8. Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	16	5		2	9							
Итого по содержательному модулю 2	60	18	-	12	30							

	Содержательный модуль 3											
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов											
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения					
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 9. Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	15	5		4	6							
Тема 10. Концепция молекулярного распознавания химических частиц вещества на уровне их взаимодействия.	14	5		2	7							
Тема 11. QSAR и QSPR компьютерные технологии структурной химии	11	3		2	6							
Тема 11. Методология молекулярной механики	11	3		2	6							
Тема 13. Вычислительный эксперимент в структурной химии	9	2		2	5							
Итого по содержательному модулю 3	60	18	-	12	30							
Всего часов по дисциплине	180	54		36	90							

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Темы лекционных занятий

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	Молекулярная структура вещества	3
2	Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	6
3	Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	6

4	Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	3
5	Методология конформационного анализа химических соединений.	5
6	Структурная поляризация химических соединений	3
7	Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	5
8	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	5
9	Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	5
10	Концепция молекулярного распознавания химических частиц вещества на уровне их взаимодействия.	5
11	QSAR и QSPR компьютерные технологии структурной химии	3
12	Методология молекулярной механики	3
13	Вычислительный эксперимент в структурной химии	2
	ВСЕГО	54

Темы лабораторных занятий

№ п/п	Название темы	<i>Количество часов</i>
1.	HyperChem методология определения параметров статической и динамической молекулярной структуры химических соединений	2
2.	Методология квантовохимического расчета при заданной температуре	2
3.	Методология расчета QSAR параметров химических соединений	2
4.	Методология квантовохимического расчета в режиме координат внутреннего обращения	2
5.	Методология конформационного анализа химических соединений	2
6.	Методология определения энергии ионизации химических соединений	2
7.	Методология определения энергии диссоциации химических соединений	2
8.	Методика конструирования супрамолекулярных наноасоциатов	2
9.	Молекулярное моделирование 2D супрамолекулярных асоциатов	2
10.	Молекулярное моделирование 3D супрамолекулярных асоциатов	2
11.	моделирование супрамолекулярных объемных наноасоциатов	2
12.	Молекулярное моделирование супрамолекулярных макроциклических асоциатов	2
13.	Динамическая комплементарность реагентов супрамолекулярных реакций	2
14.	Хелатный и макроциклический эффекты	2
15.	Темплатное молекулярное моделирование	2
16.	Молекулярный докинг системы органический пероксид – галогенид тетраалкиламония	2
17.	Структура и термодинамика образования комплексов криптанов с ионами металлов	2
18.	Молекулярное моделирование структуры сферандов и их металло-комплексов	2
	ВСЕГО	36

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Организация самостоятельной работы студентов

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	Молекулярная структура вещества	4
2	Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	10
3	Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	8
4	Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	8
5	Методология конформационного анализа химических соединений.	7
6	Структурная поляризация химических соединений	7
7	Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	7
8	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	9
9	Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	6
10	Концепция молекулярного распознавания химических частиц вещества на уровне их взаимодействия.	7
11	QSAR и QSPR компьютерные технологии структурной химии	6
12	Методология молекулярной механики	6
13	Вычислительный эксперимент в структурной химии	5
	ВСЕГО	90

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

(не предусмотрены программой)

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

- Молекулярная структура химических частиц вещества.
- Топологическая и геометрическая; статическая и динамическая; L, T, I и континуальная модель молекулярной структуры вещества.
- Стереохимическое описание молекулярной структуры.
- Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества методами компьютерной структурной химии.
- Дифракционные методы определения молекулярной структуры вещества.
- Методология установления молекулярной структуры вещества методом рентгеноструктурного анализа.
- r – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- r' – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- r, U – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- r, ρ – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- Методология установления молекулярной структуры вещества методом электронографии.

12. Методология установления молекулярной структуры вещества методом нейтронографии.
13. Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.
14. Влияние агрегатного состояния вещества на его молекулярную структуру.
15. Методология конформационного анализа химических соединений.
16. Поверхность потенциальной энергии, конформации и конформеры химических частиц вещества, число конформеров в конформационной смеси, барьеры внутреннего вращения.
17. Уравнения определения состава равновесной смеси двух конформеров.
18. Уравнения определения состава равновесной смеси трех конформеров.
19. Методология определения состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии
20. Методология определения состава смеси конформеров методами спектроскопической химии.
21. Методология определения состава смеси конформеров методом дипольных моментов.
22. Конформационная номенклатура.
23. Спектроскопия и спектроскопическая информация.
24. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с радиоволновым электромагнитным излучением.
25. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с микроволновым электромагнитным излучением.
26. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с инфракрасным электромагнитным излучением.
27. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с ультрафиолетовым электромагнитным излучением.
28. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с рентгеновским электромагнитным излучением.
29. Необходимое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц.
30. Спектроскопические информационно-поисковые системы структурной химии.
31. Методология установления молекулярной структуры химических частиц вещества с использованием спектроскопических экспертных систем структурной химии.
32. Спектроскопический безэталонный анализ структурной химии.
33. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
34. Параметры электронодонорных и электроноакцепторных свойства химических частиц вещества.
35. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии.
36. Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц.
 37. Принцип Франка - Кондона.
 38. Определение потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии.
 - Адиабатический потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы.
 - Вертикальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы.
 - Орбитальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы.
 39. Определение энергии сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии
 - Энергия адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
 - Энергия вертикального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
 - Энергия орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.

1. Атомно-молекулярная поляризация химических частиц вещества.
2. Постоянный электрический дипольный момент химических частиц вещества.
3. Индуцированная молекулярная поляризация и индуцированный дипольный момент химических частиц вещества.
4. Мгновенная молекулярная поляризация и мгновенный дипольный момент химических частиц вещества.
5. Поляризуемость химических частиц вещества.
6. Сверхполяризуемость химических частиц вещества.
7. Молекулярная и молярная поляризация вещества. Уравнение Клаузиуса -Моссоти.
8. Молекулярная и молярная электронная поляризация вещества. Уравнение Лорентца - Лоренца.
9. Молекулярная и молярная атомная поляризация вещества.
10. Молекулярная и молярная ориентационная поляризация вещества. Уравнение Дебая.
11. Методология экспериментального определения дипольных моментов химических частиц вещества.
12. Методология квантово-химического расчета дипольных моментов.
13. Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов

14. Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи.
15. Концепция валентности в теории химической связи.
16. Концепция электронно-ионной теории химической связи (Коссель).
17. Концепция электронных пар в теории химической связи (Льюис).
18. Концепция орбитально-электростатических взаимодействий в теории химической связи.
19. Принцип соответствия атомных орбиталей в процессе образования химической связи,
20. Графически представить взаимодействие s – АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\phi_s + c_{i\mu}\phi_s + \dots$$
21. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\phi_s - c_{i\mu}\phi_s + \dots$$
22. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\phi_s + c_{i\mu}\phi_s + \dots$$
23. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\phi_s - c_{i\mu}\phi_s + \dots$$
24. Графически представить σ - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\phi_{py} - c_{i\mu}\phi_{py} + \dots$$
25. Графически представить σ - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\phi_{py} - c_{i\mu}\phi_{py} + \dots$$
26. Графически представить σ - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодей-

ствия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

27. Графически представить σ - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

28. Графически представить π - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\varphi_{Py} - c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

29. Графически представить π - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

30. Графически представить π - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

31. Графически представить π - взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\varphi_{Py} - c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

32. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\varphi_s - c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

33. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\varphi_s + c_{i\mu}\varphi_{Py_-} + \dots$$

34. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\varphi_s + c_{i\mu}\varphi_{Pz_-} + \dots$$

35. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$36. \psi_i = \dots - c_{iv}\varphi_s - c_{i\mu}\varphi_{Pz_-} + \dots$$

37. Энергия двухатомных взаимодействий (E_{AB}) в приближении Малликена.

38. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий.

39. Энергия ионных двухатомных взаимодействий.

40. Энергия диссоциации химических соединений.

41. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействий в молекулах.

42. Теорема Гельмана-Фейнмана.

43. Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.

44. Сформулировать теорему вририала.

45. Получить выражение теоремы вририала для не равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.

46. Получить выражение теоремы вририала для равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.

47. Используя теорему вририала получить выражение $V = 2E$.

48. Используя теорему вириала получить выражение $T = -E$.
49. Используя теорему вириала получить выражение $V = -2T$.
50. Объяснить действие теоремы вириала в процессе образования химической связи.
51. Основное синглетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
52. Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
53. Триплетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
54. Возбужденное электронное состояние атмосферного молекулярного кислорода, его спин и спиновая мультиплетность.
55. Основное электронное состояние атмосферного молекулярного кислорода, его спин и спиновая мультиплетность.
56. Основное электронное состояние химических частиц вещества
57. Образование и дезактивация электронно-возбужденного синглетного состояния химических частиц: диаграмма Яблонского.
58. Процесс внутренней электронной конверсии.
59. Процесс интеркомбинационной электронной конверсии.
60. Процесс флуоресценции.
61. Процесс фосфоресценции.
62. Спин и спиновая мультиплетность катионов химических частиц.
63. Спин и спиновая мультиплетность анионов химических частиц.
64. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: катионов-радикалов.
65. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов.
66. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: анион-радикалов.
67. Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия и их прочность.
68. Ван-дер-Ваальсовы интра- и интермолекулярные взаимодействия.
69. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
70. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
71. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
72. Н - взаимодействия реагентов.
73. Ассоциаты янус-молекул
74. Энергия Н - связи
75. Профили ППЭ Н – ассоциатов
76. Длина Н – связи.
77. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов.
78. Изменение длины связи $\sim X-H \dots$ в Н-ассоциатах
79. Конфигурация фрагмента $\sim X-H \dots Y \sim$ в Н-ассоциатах.
80. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах.
81. ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов.
82. Дипольный момент Н-ассоциатов.

9. ОБРАЗЕЦ МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Специальность: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**
Программа подготовки: **специалитет**
Семестр **6**
Учебная дисциплина **Строение вещества**

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ВАРИАНТ №1

1. Аргументировать методологию определения адиабатического потенциала ионизации молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{N}$. Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.
2. Описать методологию определения орбитального сродства к электрону в соответствии теоремы Купманса молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{N}$. Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.
3. Объяснить методологию определения энергии дезактивации триплетного электронного состояния (T_1) молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ путем фосфоресценции ($T_1 \rightarrow S_0$). Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.
4. Определить спин и спиновую мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов.

Утверждено на заседании кафедры физической химии,
протокол № ____ от «____» _____ 20____ г.

Заведующий кафедрой
Преподаватель

В.М. Михальчук
Н.А. Туровский

Критерии оценивания модульного контроля

<i>Номер задания</i>	<i>Количество баллов</i>
1	25
2	25
3	25
4	25
Всего	100

10. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

Теоретические вопросы к экзамену

1. Молекулярная структура химических частиц вещества.
2. Топологическая и геометрическая; статическая и динамическая; L, T, I и континуальная модель молекулярной структуры вещества.
3. Стереохимическое описание молекулярной структуры.
4. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества методами компьютерной структурной химии.

5. Дифракционные методы определения молекулярной структуры вещества.
6. Методология установления молекулярной структуры вещества методом рентгеноструктурного анализа.
7. r – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
8. r' – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
9. r, U – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
10. r, ρ – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
11. Методология установления молекулярной структуры вещества методом электронографии.
12. Методология установления молекулярной структуры вещества методом нейтронографии.
13. Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.
14. Влияние агрегатного состояния вещества на его молекулярную структуру.
15. Методология конформационного анализа химических соединений.
16. Поверхность потенциальной энергии, конформации и конформеры химических частиц вещества, число конформеров в конформационной смеси, барьеры внутреннего вращения.
17. Уравнения определения состава равновесной смеси двух конформеров.
18. Уравнения определения состава равновесной смеси трех конформеров.
19. Методология определения состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии
20. Методология определения состава смеси конформеров методами спектродетекторно-структурной химии.
21. Методология определения состава смеси конформеров методом дипольных моментов.
22. Конформационная номенклатура.
23. Спектроскопия и спектродетекторная информация.
24. Спектродетекторные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с радиоволновым электромагнитным излучением.
25. Спектродетекторные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с микроволновым электромагнитным излучением.
26. Спектродетекторные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с инфракрасным электромагнитным излучением.
27. Спектродетекторные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с ультрафиолетовым электромагнитным излучением.
28. Спектродетекторные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с рентгеновским электромагнитным излучением.
29. Необходимое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц.
30. Спектродетекторные информационно-поисковые системы структурной химии.
31. Методология установления молекулярной структуры химических частиц вещества с использованием спектродетекторных экспертных систем структурной химии.
32. Спектродетекторный безэталонный анализ структурной химии.
33. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
34. Параметры электронодонорных и электроноакцепторных свойства химических частиц вещества.
35. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии.
36. Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц.
37. Принцип Франка - Кондона.

38. Методология определения потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии.
39. Методология определения адиабатического потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии..
40. Структурные изменения химической частицы в процессе адиабатической ионизации.
41. Методология определения вертикального потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии.
42. Структурные изменения химической частицы в процессе вертикальной ионизации.
43. Методология определения орбитального потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии..
44. Структурные изменения химической частицы при определении потенциала ионизации в соответствии с теоремой Купманса.
45. Определение энергии сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии
46. Определение энергии адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
47. Определение энергии вертикального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
48. Определение энергии орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
49. Атомно-молекулярная поляризация химических частиц вещества.
50. Постоянный электрический дипольный момент химических частиц вещества.
51. Индуцированная молекулярная поляризация и индуцированный дипольный момент химических частиц вещества.
52. Мгновенная молекулярная поляризация и мгновенный дипольный момент химических частиц вещества.
53. Поляризуемость химических частиц вещества.
54. Сверхполяризуемость химических частиц вещества.
55. Молекулярная и молярная поляризация вещества. Уравнение Клаузиуса -Моссоти.
56. Молекулярная и молярная электронная поляризация вещества. Уравнение Лорентца - Лоренца.
57. Молекулярная и молярная атомная поляризация вещества.
58. Молекулярная и молярная ориентационная поляризация вещества. Уравнение Дебая.
59. Методология экспериментального определения дипольных моментов химических частиц вещества.
60. Методология квантово-химического расчета дипольных моментов.
61. Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов
62. Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи.
63. Концепция валентности в теории химической связи.
64. Концепция электронно-ионной теории химической связи (Коссель).
65. Концепция электронных пар в теории химической связи (Льюис).
66. Концепция орбитально-электростатических взаимодействий в теории химической связи.
67. Принцип соответствия атомных орбиталей в процессе образования химической связи,
68. Графически представить взаимодействие s – АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{iv}\phi_s + c_{i\mu}\phi_s + \dots$$
69. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\phi_S + c_{i\mu}\phi_{Pz_-} + \dots$$

84. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots - c_{iv}\phi_S - c_{i\mu}\phi_{Pz_-} + \dots$$

85. Энергия двухатомных взаимодействий (E_{AB}) в приближении Малликена.
86. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий.
87. Энергия ионных двухатомных взаимодействий.
88. Энергия диссоциации химических соединений.
89. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействий в молекулах.
90. Теорема Гельмана-Фейнмана.
91. Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.
92. Сформулировать теорему вриала.
93. Получить выражение теоремы вриала для не равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.
94. Получить выражение теоремы вриала для равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.
95. Используя теорему вриала получить выражение $V = 2E$.
96. Используя теорему вриала получить выражение $T = -E$.
97. Используя теорему вриала получить выражение $V = -2T$.
98. Объяснить действие теоремы вриала в процессе образования химической связи.
99. Основное синглетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
100. Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
101. Триплетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
102. Возбужденное электронное состояние атмосферного молекулярного кислорода, его спин и спиновая мультиплетность.
103. Основное электронное состояние атмосферного молекулярного кислорода, его спин и спиновая мультиплетность.
104. Основное электронное состояние химических частиц вещества
105. Образование и дезактивация электронно-возбужденного синглетного состояния химических частиц: диаграмма Яблонского.
106. Процесс внутренней электронной конверсии.
107. Процесс интеркомбинационной электронной конверсии.
108. Процесс флуоресценции.
109. Процесс фосфоресценции.
110. Спин и спиновая мультиплетность катионов химических частиц.
111. Спин и спиновая мультиплетность анионов химических частиц.
112. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: катионов-радикалов.
113. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов.
114. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: анион-радикалов.
115. Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия и их прочность.
116. Ван-дер-Ваальсовы интра- и интермолекулярные взаимодействия.
117. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
118. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
119. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.

120. Н - взаимодействия реагентов.
121. Ассоциаты янус-молекул
122. Энергия Н - связи
123. Профили ППЭ Н – ассоциатов
124. Длина Н – связи.
125. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов.
126. Изменение длины связи $\sim X-H \dots$ в Н-ассоциатах
127. Конфигурация фрагмента $\sim X-H \dots Y \sim$ в Н-ассоциатах.
128. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах.
129. ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов.
130. Дипольный момент Н-ассоциатов.

Образец экзаменационного билета

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

<i>Специальность:</i>	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
<i>Программа подготовки:</i>	специалитет
<i>Семестр</i>	6
<i>Учебная дисциплина</i>	Строение вещества

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = \dots + c_{i\nu}\varphi_s + c_{i\mu}\varphi_{py} +$$

1. Получить выражение теоремы вириала для равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.
2. Аргументировать процесс флуоресценции.
3. Методология определения вертикального потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии.
4. Структурные изменения химической частицы в процессе вертикальной ионизации.

Утверждено на заседании кафедры физической химии
 Протокол № от « » 20__ г.

Заведующий кафедрой _____ проф. Михальчук В.М.

Экзаменатор _____ доц. Туровский Н.А.

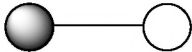
Критерии оценивания экзамена




Номер задания	Количество баллов
1	10
2	10
3	10
4	10
5	10
Всего	50 баллов

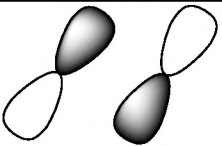
11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенных тестах укажите правильный ответ (правильных вариантов ответа один или несколько).

1.	<p>Уравнение Больцмана для распределения конформеров в их смеси имеет вид...</p> <p>а. $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$;</p> <p>б. $\Delta H - T\Delta S = -RT \ln K_{кр}$;</p> <p>в. $K_{кр} = \exp (-(\Delta H/RT) + (\Delta S/R))$</p> <p>г. $\Delta G = -RT \ln K_{кр}$</p>	
2.	<p>На ППЭ имеется стационарная точка глобального (наиболее глубокого) минимума, отвечающая равновесной пространственной атомной конфигурации молекулы с ... энергией.</p> <p>а. наименьшей;</p> <p>б. равной нулю;</p> <p>в. наибольшей</p>	
3.	<p>Потенциальная энергия молекулы является многомерной функцией координат атомов, каждой точке которой отвечает определенная пространственная геометрическая конфигурация ядер; эту функцию называют;</p> <p>а. молекулярной конформацией;</p> <p>б. конформером;</p> <p>в. поверхностью потенциальной энергии (ППЭ).</p>	
4.	<p>Ионизация химических частиц вещества с изменением молекулярной геометрии является ... процессом.</p> <p>а. вертикальным;</p> <p>б. постоянным;</p> <p>в. интегральным;</p> <p>г. адиабатическим;</p>	
5.	<p>Энергия, выделяющаяся при присоединении электрона к химической частице с образованием анион-радикала (аниона), называется:</p> <p>а. орбитальная энергия;</p> <p>б. вертикальный потенциал ионизации;</p> <p>в. конформационная энергия;</p> <p>г. сродство к электрону.</p>	
6.	<p>Дипольные моменты обычно выражаются в:</p> <p>а. нанометрах;</p> <p>б. амперах;</p> <p>в. дебаях;</p> <p>г. \AA^3.</p>	
7.	<p>Дипольный момент имеет направление, в химии принято считать, что он направлен от ... заряженного конца вектора дипольного момента к....</p> <p>а. положительно</p> <p>б. отрицательно;</p> <p>в. отрицательному</p> <p>г. положительному.</p>	
8.	<p>Отклик поляризации химических частиц в процессе образования их из атомов – это ... дипольный момент.</p>	

	а. постоянный; б. временный; в. мгновенный; г. истинный; д. ориентационный; е. индуцированный,	
9.	Поляризуемость молекулы (α) – это: коэффициент пропорциональности в уравнении зависимости индуцированного дипольного момента от ... среднего макроскопического поля. а. напряженности (E); б. квадрата напряженности (E^2); в. корня квадратного напряженности ($E^{1/2}$)	
10.	Способность растворителя разрушать ионные кристаллы связана с его способностью сольватировать ионы и ... электростатическое взаимодействие, удерживающее ионы в кристалле. Один конец диполя полярных молекул растворителя может электростатически притягиваться к иону противоположного знака, и это ... потенциальную энергию взаимодействия ионов в растворе. а. понижает; б. повышает; в. нивелирует.	
11.	Проанализировать структуру МО $(\psi_2) \psi_2 = \dots + c_{21}\phi_{S(A)} - c_{22}\phi_{S(B)} + \dots$ и определить тип вклада в образование химической связи s – АО, которые центрированы на атомах А и В а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.	
12.	Проанализировать структуру МО (ψ_2) $\psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{S(A)} + c_{22}\phi_{P_x(B)} + \dots$ и определить тип вклада s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи. а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.	
13.	S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию.  Выбрать компоненты $c_{21}\phi_{S(A)}$ и $c_{22}\phi_{S(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь: $\Psi_2 = \dots c_{21}\phi_{S(A)} \dots c_{22}\phi_{S(B)} +$ а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $- c_{21}\phi_{S(A)}$;	

	<p>д. $+ c_{21}\varphi_{S(A)}$; е. $- c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. $+ c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
14.	<p>рх АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{P_X(A)}$ и $c_{22}\varphi_{P_X(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{P_X(A)} \dots c_{22}\varphi_{P_X(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{P_X(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{P_X(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{P_X(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{P_X(B)}$.</p>	
15.	<p>рх АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{P_X(A)}$ и $c_{22}\varphi_{P_X(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{P_X(A)} \dots c_{22}\varphi_{P_X(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{P_X(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{P_X(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{P_X(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{P_X(B)}$.</p>	
16.	<p>рх и S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{P_X(A)}$ и $c_{22}\varphi_{S(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{P_X(A)} \dots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{P_X(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{P_X(A)}$; е. $- c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. $+ c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
17.	<p>Рz АО центрированы на атомах А и В и образуют ... π-комбинацию</p>	

	 <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{Pz(A)}$ и $c_{22}\varphi_{Pz(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{Pz(A)} \dots c_{22}\varphi_{Pz(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{Pz(A)}$; д. $+c_{21}\varphi_{Pz(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{Pz(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{Pz(B)}$.</p>	
18.	Химическая система будет в состоянии равновесия, если суммарные силы Гельмана – Фейнмана действующие на каждый ее атом будут ...:	
	а. максимальные; б. минимальные; в. равны нулю; г. отрицательные.	
19.	Согласно концепции Гельмана – Фейнмана в теории химической связи межъядерное отталкивание ... образованию химической связи.	
	а. способствует; б. не способствует.	
20.	Согласно концепции Гельмана – Фейнмана в теории химической связи ядерно-электронные взаимодействия антисвязывающей области ... образованию химической связи.	
	а. способствуют; б. не способствуют.	

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

*Распределение баллов, которые могут получить студенты
в процессе изучения дисциплины*

Организационно-учебная работа студента	Текущий контроль	Всего
	Тестирование Письменные работы: практические задания, задания репродуктивного уровня, задания для домашней работы, контрольные работы Задания к лабораторным работам Устное собеседование.	50 баллов
max 5 баллов	max 45 баллов	

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Сумма баллов по 100 балльной шкале	По шкале ECTS	По государственной шкале	При оценке экзамена преподаватель руководствуется следующими принципами
90–100	A	«Отлично» (5)	показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы
80–89	B	«Хорошо» (4)	показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности
75–79	C		показаны систематические знания при ответе на все вопросы билета, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности
70–74	D	«Удовлетворительно» (3)	показаны несистематические и неглубокие знания при ответе на вопросы билета, при ответе допущено несколько ошибок, исправленных самим студентом
60–69	E		поверхностные знания при ответе на вопросы билета, допущено ряд неточностей, которые студент не в состоянии самостоятельно исправить
35–59	FX	«Неудовлетворительно» с возможностью повторной аттестации (2)	нет ответов на основные вопросы билета, нет ответов на дополнительные и наводящие вопросы
0-34	F	«Неудовлетворительно» (2) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	выполнение менее 30 % обязательных заданий; неумение раскрыть основное содержание задания; неспособность формулировать выводы.

12. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории оборудованной меловой доской, мультимедийным проектором и экраном. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе: 10 персональных компьютеров. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

13. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№ п/п	Наименование	Кол-во эк- земпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
<i>Основная литература</i>			
1.	Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В. Г. Цирельсон // М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2010. - 496 с.	30	+
2.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	
3.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	Электронный ресурс	
4.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Електронний ресурс]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк : ДонНУ, 2009.	Электронный ресурс	+
5.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Текст]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Текст]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с.	17	+
6.	Опейда, Й.О. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії [Електронний ресурс] / Й.О. Опейда; Ін-т фізико-орг. хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України. – Донецьк: ДонНУ, 2013. / Опейда, И.А. Математическое и компьютерное моделирование в химии [Электронный ресурс] / И.А. Опейда; Ин-т физико-орг. химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАН Украины. – Донецк : ДонНУ, 2013.	Электронный ресурс	+
<i>Дополнительная литература</i>			
7.	Semiempirical and DFT Modeling of the IR Spectra of Benzoyl Peroxide Derivatives / N.A. Turovskij et al. // On the borders of physics, chemistry, biology, medicine and agriculture. Re-search and development / ed. O.V. Stoyanov, E. Ktodzińska, G.E. Zaikov; Inst. for Engineering of Polymer Materials and Dyes. – Toruń, 2014. – Vol. II. – P. 131-143. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4321	Электронный ресурс	+
8.	Ракша, О.В. Інформатика, інформаційні технології [Електронний ресурс]: для студ. хім. спец. / О.В. Ракша, О.М. Пастернак, М.А. Туровський; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2011. – 118 с.	Электронный ресурс	+

	Ракша, Е.В. Информатика, информационные технологии [Электронный ресурс]: для студ. хим. спец. / Е.В. Ракша, Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский; Донецкий нац. ун-т. – Донецк: ДонНУ, 2011. – 118 с.		
--	---	--	--

14. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. <http://mondnrjoru/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики
2. <http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

(при наличии. Обязательное наличие лицензии!!!! Или личные авторские разработки)

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46484614);
2. Microsoft Office ((корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46472919);
3. МОРАС 2016 – комплекс программ структурной химии (программа доступа бесплатно для академического, некоммерческого использования. Академическая лицензия).
4. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
5. Лицензия GPL, Apach, BSD для свободного программного обеспечения:
 - Антивирус Касперского;
 - Adobe Acrobat Reader.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на _____ год.

Протокол № _____ от « _____ » _____ г.

Заведующий кафедрой _____

В.М. Михальчук