

**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Мордовский государственный педагогический
университет имени М.Е. Евсевьева»**

Факультет естественно-технологический
Кафедра химии, технологии и методик обучения

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля): Строение молекул и основы квантовой химии

Уровень ОПОП: Бакалавриат

Направление подготовки: 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки)

Профиль подготовки: Биология. Химия

Форма обучения: Очная

Разработчики: Панькина В. В., канд. пед. наук, ст. преподаватель;

Алямкина Е. А., канд. хим. наук, доцент;

Коткин А. И., преподаватель

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры, протокол № 12 от 20.04.2016 года

Зав. кафедрой  Жукова Н. В.

Программа с обновлениями рассмотрена и утверждена на заседании кафедры, протокол № 1 от 28.08.2019 года

Зав. кафедрой  Ляпина О. А.

Программа с обновлениями рассмотрена и утверждена на заседании кафедры, протокол № 1 от 31.08.2020 года

Зав. кафедрой  Ляпина О. А.

1. Цель и задачи изучения дисциплины

Цель изучения дисциплины - закрепить, углубить и расширить теоретические знания о строении атомов и молекул, природу химической связи, изучить общие закономерности в области квантовой химии, необходимых для реализации образовательной программы по химии в соответствии с требованиями образовательных стандартов.

Задачи дисциплины:

- сформировать у студентов представление о месте квантовой химии среди других наук, о значении и областях использования вычислительных методов теоретической химии;
- сформировать у студентов представления о фундаментальных понятиях электронного строения молекул;
- ознакомление студентов с математическим аппаратом квантовой химии;
- ознакомление с основными расчетными методами, используемыми в квантовой химии;
- формирование представлений об основных принципах корреляционной связи между электронной структурой и реакционной способностью рассматриваемого объекта.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» относится к вариативной части учебного плана.

Дисциплина изучается на 4 курсе, в 8 семестре.

Для изучения дисциплины требуется: знания, умения, навыки, способы деятельности и установки, полученные и сформированные в ходе изучения дисциплин «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», теоретические основы изучения химических понятий.

Изучению дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» предшествует освоение дисциплин (практик):

Органическая химия;
Общая и неорганическая химия;
Физическая химия;
Химия неметаллов;
Химия металлов;
Количественные расчеты по химии.

Освоение дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» является необходимой основой для последующего изучения дисциплин (практик):

Неорганический синтез;
Органический синтез;
Современные проблемы органической синтеза;
Педагогическая практика.

Область профессиональной деятельности, на которую ориентирует дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии», включает: образование, социальную сферу, культуру.

Освоение дисциплины готовит к работе со следующими объектами профессиональной деятельности:

- обучение;
- воспитание;
- развитие;
- просвещение;
- образовательные системы.

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и учебным планом:

научно-исследовательская деятельность

- постановка и решение исследовательских задач в области науки и образования;
- профессиональной деятельности методов научного исследования.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование компетенций и трудовых функций (профессиональный стандарт Педагог (педагогическая деятельность в дошкольном, начальном общем, основном общем, среднем общем образовании) (воспитатель, учитель), утвержден приказом Министерства труда и социальной защиты №544н от 18.10.2013).

Выпускник должен обладать следующими профессиональными компетенциями (ПК) в соответствии с видами деятельности:

ПК-1. готовностью реализовывать образовательные программы по учебным предметам в соответствии с требованиями образовательных стандартов
--

педагогическая деятельность

ПК-1 готовностью реализовывать образовательные программы по учебным предметам в соответствии с требованиями образовательных стандартов	знать: - теоретические основы современной квантовой химии; - основные положения современной теории химической связи; - взаимосвязь между электронной структурой и физико-химическими свойствами молекул; - возможности основных современных квантово-химических расчетных методов и области их применимости; уметь: - грамотно решать задачи по строению молекул, выбирать оптимальные пути и методы решения теоретических задач; - решать уравнение Шредингера и интерпретировать полученное решение для простейших молекулярных систем в приближении линейных комбинаций атомных орбиталей; - обсуждать результаты исследований по квантовой химии, ориентироваться в современной литературе по квантовой химии; владеть: - основными понятиями квантово-химического описания электронной структуры молекул; - представлениями о месте квантовой химии среди других наук, о значении и областях использования вычислительных методов теоретической химии; - знаниями основ теории главных разделов квантовой химии и строения молекул, применением основных законов, методикой выполнения расчетов с помощью известных формул и уравнений, справочной литературой по квантовой химии.
--	--

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Восьмой семестр
Контактная работа (всего)	28	28
Лекции	14	14
Практические	14	14
Самостоятельная работа (всего)	44	44
Виды промежуточной аттестации		
Зачет		+
Общая трудоемкость часы	72	72
Общая трудоемкость зачетные единицы	2	2

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание модулей дисциплины

Модуль 1. Строение веществ с точки зрения квантовой химии:

Введение в квантовую химию. Математический аппарат квантовой химии. Радиальное уравнение Шредингера. Атом Н. Строение веществ с точки зрения квантовой химии.

Модуль 2. Образование химических связей с точки зрения квантовой химии:

Химическая связь и строение вещества. Ковалентная связь. Ионная и металлическая связь. Межмолекулярные взаимодействия. Координационные соединения.

5.2. Содержание дисциплины:

Лекции (14 ч.)

Модуль 1. Строение веществ с точки зрения квантовой химии (6 ч.)

Тема 1. Введение в квантовую химию. Математический аппарат квантовой химии (2 ч.)

1. Краткие сведения об истории развития квантовой химии.
2. Предмет и задачи квантовой химии.
3. Основные понятия квантовой химии.
4. Методы квантовой химии.
5. Математический аппарат квантовой химии.
- 5.1. Операторное исчисление.
- 5.2. Линейные самосопряженные операторы.
- 5.3. Операторы потенциальной энергии, проекции момента импульса и кинетической энергии.
- 5.4. Собственные значения и собственные функции линейного самосопряженного оператора.
- 5.5. Волновые функции, на которых определены линейные самосопряженные операторы и их свойства.

Тема 2. Радиальное уравнение Шредингера. Атом Н (2 ч.)

1. Стационарное уравнение Шредингера и функция Гамильтона.
2. Приближения, используемые при описании движения электрона в атоме водорода.
3. Сферическая система координат.
4. Два типа решения радиального уравнения Шредингера для атома Н.
5. Атомная орбиталь.
6. Радиальные функции и радиальные функции распределения атома Н и водородоподобных атомов.
7. Узловые поверхности

Тема 3. Строение веществ с точки зрения квантовой химии (2 ч.)

1. Теория строения атома Бора. Заряд ядра и порядковый номер элемента
2. Современное представление о строении атома.
3. Волновой характер движения микрочастиц.
4. Волновая функция. Волновое уравнение Шредингера.
5. Квантовые числа.
6. Принципы заполнения атомных орбиталей.
7. Основные характеристики атомов.
- 7.1. Атомный радиус
- 7.2. Потенциал ионизации
- 7.3. Сродство к электрону
- 7.4. Магнитный момент
8. Атомные спектры. Спектр атома водорода: серии Лаймана, Бальмера и Пашена.

Модуль 2. Образование химических связей с точки зрения квантовой химии (8 ч.)

Тема 4. Химическая связь и строение вещества (2 ч.)

1. Основные характеристики химической связи.
2. Природа химической связи. Механизм образования химической связи, разработанный для молекулы водорода. Изменение потенциальной энергии системы двух атомов водорода при образовании химической связи.
3. Классификация и характеристика типов связи в зависимости от симметрии электронных облаков.
4. Спектральные методы исследования

Тема 5. Ковалентная связь (2 ч.)

- 1 Метод валентных связей
- 2.1. Основные положения метода ВС. Валентность.
 - 2.2. Насыщаемость связи
 - 2.3. Прочность связи
 - 2.4. Полярность связи
 - 2.5. Направленность связи. Гибридизация.
 - 2.5.1. Основные положения теории гибридизации.
 - 2.5.2. sp -гибридизация (на конкретных примерах).
 - 2.5.3. sp^2 -гибридизация (на конкретных примерах).
 - 2.5.4. sp^3 -гибридизация (на конкретных примерах).
 - 2.6. Резонансные структуры.
 - 2.7. Теория взаимного отталкивания электронных пар (модель Гиллеспи).
 - 2.7.1. Теория пространственного строения молекул Гиллеспи.
 - 2.7.2. Молекулы AH , AH_2 , AH_3 , AH_2E , AH_4 , AH_3E , AH_2E_2 , AH_5 , AH_4E , AH_3E_2 , AH_2E_3 , AH_6 , AH_5E , AH_4E_2 , с точки зрения пространственного строения молекул Гиллеспи.
 - 2.8. Метод молекулярных орбиталей (ММО).
 - 2.8.1. Сущность ММО.
 - 2.8.2. Принципы построения МО двухатомных гомоядерных молекул.
 - 2.8.3. Принципы построения МО двухатомных гетероядерных молекул.
 - 2.8.4. Геометрия молекул.
 - 2.9. Сравнительная характеристика методов валентной связи и молекулярных орбиталей

Тема 6. Ионная и металлическая связь. Межмолекулярные взаимодействия (2 ч.)

1. Ионная связь.
 - 1.1 Прочность.
 - 1.2. Пространственное расположение ионов.
 - 1.3. Электронная структура.
2. Металлическая связь.
3. Межмолекулярные взаимодействия.
 - 3.1. Ван-дер-ваальсовы взаимодействия.
 - 3.2. Водородная связь.
 - 3.3. Гидрофобные взаимодействия.
4. Основные типы кристаллических решеток. Взаимосвязь между типом химической связи, кристаллической решеткой и физическими свойствами соединения

Тема 7. Координационные соединения (2 ч.)

1. Основные понятия.
2. Типы изомерии комплексных соединений.
3. Строение комплексных соединений.
 - 3.1. Строение координационных соединений с точки зрения метода валентных связей.
 - 3.2. Теория кристаллического поля.
 - 3.3. Прочность связи.
 - 3.4. Магнитные свойства.
 - 3.5. Окраска комплексов.
- 3.1. Строение координационных соединений с точки зрения ММО
4. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул и ионов.

5. Энергетические диаграммы гетероядерных молекул и ионов.
6. Какую информацию о строении и свойствах молекул можно извлечь из энергетических диаграмм МО

5.3. Содержание дисциплины: Практические (14 ч.)

Модуль 1. Строение веществ с точки зрения квантовой химии (6 ч.)

Тема 1. Введение в квантовую химию (2 ч.)

1. Краткие сведения об истории развития квантовой химии.
2. Предмет и задачи квантовой химии.
3. Основные понятия квантовой химии.
4. Методы квантовой химии.
5. Математический аппарат квантовой химии.
- 5.1. Операторное исчисление.
- 5.2. Линейные самосопряженные операторы.
- 5.3. Операторы потенциальной энергии, проекции момента импульса и кинетической энергии.
- 5.4. Собственные значения и собственные функции линейного самосопряженного оператора.
- 5.5. Волновые функции, на которых определены линейные самосопряженные операторы и их свойства

Тема 2. Радиальное уравнение Шредингера. Атом Н (2 ч.)

1. Стационарное уравнение Шредингера и функция Гамильтона.
2. Приближения, используемые при описании движения электрона в атоме водорода.
3. Сферическая система координат.
4. Два типа решения радиального уравнения Шредингера для атома Н.
5. Атомная орбиталь.
6. Радиальные функции и радиальные функции распределения атома Н и водородоподобных атомов.
7. Узловые поверхности

Тема 3. Строение веществ с точки зрения квантовой химии (2 ч.)

1. Теория строения атома Бора. Заряд ядра и порядковый номер элемента
2. Современное представление о строении атома.
3. Волновой характер движения микрочастиц.
4. Волновая функция. Волновое уравнение Шредингера.
5. Квантовые числа.
6. Принципы заполнения атомных орбиталей.
7. Основные характеристики атомов.
- 7.1. Атомный радиус
- 7.2. Потенциал ионизации
- 7.3. Сродство к электрону
- 7.4. Магнитный момент
8. Атомные спектры. Спектр атома водорода: серии Лаймана, Бальмера и Пашена

Модуль 2. Образование химических связей с точки зрения квантовой химии (8 ч.)

Тема 4. Химическая связь и строение вещества (2 ч.)

1. Основные характеристики химической связи.

Подготовлено в системе 1С:Университет (000000736)

2. Природа химической связи. Механизм образования химической связи, разработанный для молекулы водорода. Изменение потенциальной энергии системы двух атомов водорода при образовании химической связи.

Подготовлено в системе 1С:Университет (000000736)

3. Классификация и характеристика типов связи в зависимости от симметрии электронных облаков.

4. Спектральные методы исследования

Тема 5. Ковалентная связь (2 ч.)

1 Метод валентных связей

2.1. Основные положения метода ВС. Валентность.

2.2. Насыщаемость связи

2.3. Прочность связи

2.4. Полярность связи

2.5. Направленность связи. Гибридизация.

2.5.1. Основные положения теории гибридизации.

2.5.2. Sp-гибридизация (на конкретных примерах).

2.5.3. Sp²-гибридизация (на конкретных примерах).

2.5.4. Sp³-гибридизация (на конкретных примерах).

2.6. Резонансные структуры.

2.7. Теория взаимного отталкивания электронных пар (модель Гиллеспи).

2.7.1. Теория пространственного строения молекул Гиллеспи.

2.7.2. Молекулы AX, AX₂, AX₃, AX₂E, AX₄, AX₃E, AX₂E₂, AX₅, AX₄E, AX₃E₂, AX₂E₃, AX₆, AX₅E, AX₄E₂, с точки зрения пространственного строения молекул Гиллеспи.

2.8. Метод молекулярных орбиталей (ММО).

2.8.1. Сущность ММО.

2.8.2. Принципы построения МО двухатомных гомоядерных молекул.

2.8.3. Принципы построения МО двухатомных гетероядерных молекул.

2.8.4. Геометрия молекул.

2.9. Сравнительная характеристика методов валентной связи и молекулярных орбиталей

Тема 6. Ионная и металлическая связь. Межмолекулярные взаимодействия (2 ч.)

1. Ионная связь. 1.1 Прочность.

1.2. Пространственное расположение ионов.

1.3. Электронная структура.

2. Металлическая связь.

3. Межмолекулярные взаимодействия.

3.1. Ван-дер-ваальсовы взаимодействия.

3.2. Водородная связь.

3.3. Гидрофобные взаимодействия.

4. Основные типы кристаллических решеток. Взаимосвязь между типом химической связи, кристаллической решеткой и физическими свойствами соединения

Тема 7. Координационные соединения (2 ч.)

1. Основные понятия.

2. Типы изомерии комплексных соединений.

3. Строение комплексных соединений.

3.1. Строение координационных соединений с точки зрения метода валентных связей.

3.2. Теория кристаллического поля.

3.3. Прочность связи.

3.4. Магнитные свойства.

3.5. Окраска комплексов.

3.1. Строение координационных соединений с точки зрения ММО

4. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул и ионов.

5. Энергетические диаграммы гетероядерных молекул и ионов.

6. Какую информацию о строении и свойствах молекул можно извлечь из энергетических диаграмм МО

6. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

6.1 Вопросы и задания для самостоятельной работы

Восьмой семестр (44 ч.)

Модуль 1. Строение веществ с точки зрения квантовой химии (22 ч.)

Вид СРС: *Подготовка письменных работ (эссе, рефератов, докладов)

Примерная тематика рефератов:

1. История открытия строения атома основные модели строения атома.

Многоэлектронные атомы.

2. Энергетические диаграммы двухатомных гомоядерных и гетероядерных молекул.
3. Электростатическая природа водородной связи
4. Кислоты и основания в координационной химии.
5. Объяснение биологических функций гемоглобина на основании квантово-

химических расчетов.

6. Изучение влияния оптической изомерии на фармакологические свойства лекарств.
7. Индуктивный и резонансный эффекты в органической химии.
8. Теория жестких и мягких кислот и оснований.
9. Трансвлияние в химии координационных соединений.
11. Донорные числа.
12. Рентгеноэлектронная спектроскопия.
13. Метод ядерного магнитного резонанса в медицине.
14. Фотоэлектронная спектроскопия
15. История становления теории резонанса как одного из направлений развития метода валентных связей.

16. Использование квантово-химических расчетов движения электронов в атомах и молекулах в органической химии.

17. История открытия метода Хартри-Фока.
18. Квантово-химическое моделирование в органической химии.

Вид СРС: *Подготовка к практическим / лабораторным занятиям

Примерный перечень вопросов к практическим занятиям:

1. Опишите энергетический спектр простейших систем: частицы в прямоугольном потенциальном ящике, гармонического осциллятора и жесткого ротатора.
2. Охарактеризуйте классификацию молекулярных орбиталей по симметрии. s- и p-орбиталей p-электронное приближение.
3. Опишите локализованные молекулярные орбитали. Изобразите гибридные орбитали и процесс гибридизации.
4. Охарактеризуйте теорию кристаллического поля. Опишите процесс расщепления d и f-уровней в полях различной симметрии.
5. Охарактеризуйте химическую связь в комплексных соединениях на основании локализованных орбиталей. Опишите атом водорода с точки зрения теории Бора. Перечислите основные характеристики химической связи.
8. Опишите методы исследования структурных свойств молекул и кристаллических соединений.
9. Поясните, что собой представляют конформации молекул и приведите примеры молекул с конформационной изомерией.
10. Каковы основные составляющие и основные типы межмолекулярных взаимодействий?
11. Каковы основные типы кристаллических решеток? Каковы основные типы дефектов в реальных кристаллах?

Вид СРС: *Выполнение индивидуальных заданий-кейсов

Подготовлено в системе 1С:Университет (000000736)

1. При проведении урока химии по теме «Строение вещества», учитель предложил учащимся охарактеризовать и привести примеры веществ молекулярного строения. Какие из нижеперечисленных ответов были верные?

1) вещества, молекулярного строения при обычных условиях имеют жидкое, газообразное и твёрдое агрегатное состояние;

2) вещества, молекулярного строения имеют низкие значения температур кипения и плавления;

3) в расплавах и растворах проводят электрический ток

4) нелетучие

5) хлорид натрия, вода, графит

6) азот, сера, аммиак

Ответ: 1, 2, 7.

2. При проведении урока химии по теме «Строение вещества», учитель предложил учащимся охарактеризовать и привести примеры веществ ионного строения. Какие из нижеперечисленных ответов были верные:

1) вещества, ионного строения при обычных условиях имеют жидкое, газообразное и твёрдое агрегатное состояние;

2) вещества, ионного строения имеют низкие значения температур кипения и плавления;

3) в расплавах и растворах проводят электрический ток

4) тугоплавкие;

5) хлорид натрия, оксид алюминия, перманганат калия

6) азот, вода, графит

Ответ: 3, 4, 5.

3. При изучении темы «Строение вещества» учитель предложил ученикам из перечня веществ выбрать вещества, которые имеют атомное строение. На какие характеристики веществ необходимо ученикам обратить внимание при выборе:

1) при обычных условиях имеют жидкое, газообразное и твёрдое агрегатное состояние

2) имеют низкие значения температур кипения и плавления

3) очень твёрдые при обычных условиях

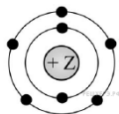
4) хрупкие

5) тугоплавкие

6) растворимы в воде

Ответ: 4, 5, 6.

4. При подготовке к контрольной работе учитель предложил учащимся по рисунку охарактеризовать модель электронного строения атома некоторого химического элемента.



На основании анализа предложенной модели записать: символ химического элемента, номер периода и группы, определить принадлежность к Ме или неМе; записать электронную формулу элемента, высшую и низшую степень окисления; число неспаренных электронов, значение для них главного и орбитального квантового числа.

1) период 2, группа 5, неМе

2) период 2, группа 5, Ме

3) $1s^2 2s^2 2p^3$, +5 и -3

4) $1s^2 2s^2 2p^2$, +3 и -5

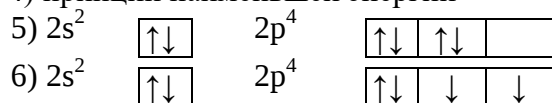
5) число неспаренных электронов 3, главное квантовое число 2, орбитальное квантовое число 1

6) число неспаренных электронов 3, главное квантовое число 2, орбитальное квантовое число 2

Ответ: 1, 3, 5.

5. Учитель предложил учащимся распределить валентные электроны в атоме кислорода. Каким правилом должны руководствоваться учащиеся при выполнении данного задания, какие ответы будут верными?

- 1) правила Клечковского
- 2) принцип Паули
- 3) правило Хунда
- 4) принцип наименьшей энергии



Ответ: 3, 6.

Модуль 2. Образование химических связей с точки зрения квантовой химии (22 ч.) Решить контрольную работу на тему «Химическая связь. Метод ВС. Метод МО»

1. Рассмотреть тип гибридизации предложенной молекулы.

sp -гибридизация (рассмотреть на конкретных примерах).

sp^2 -гибридизация (рассмотреть на конкретных примерах).

sp^3 -гибридизация (рассмотреть на конкретных примерах).

2. Описать строение предложенной молекулы с точки зрения теории пространственного строения молекул Гиллеспи.

Описать молекулы AX , AX_2 , AX_3 , AX_2E , AX_4 , AX_3E , AX_2E_2 с точки зрения пространственного строения молекул Гиллеспи.

Описать молекулы AX_5 , AX_4E , AX_3E_2 , AX_2E_3 , AX_6 , AX_5E , AX_4E_2 , с точки зрения пространственного строения молекул Гиллеспи.

3. Представить энергетическую диаграмму с точки зрения ММО предложенной молекулы. Энергетические диаграммы гомоядерных молекул и ионов (на конкретных примерах). Энергетические диаграммы гетероядерных молекул и ионов (на конкретных примерах).

Какую информацию о строении и свойствах молекул можно извлечь из энергетических диаграмм МО.

Вид СРС: *Выполнение индивидуальных заданий-кейсов

1. Учитель предложил учащимся записать распределение электронов по атомным орбиталям для кальция. Каким правилом должны руководствоваться учащиеся при выполнении данного задания, какие ответы будут верными?

- 1) правила Клечковского
- 2) принцип Паули
- 3) правило Хунда
- 4) принцип наименьшей энергии
- 5) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
- 6) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2$

Ответ: 1, 6.

2. Вода является источником жизни для всех живых организмов. Молекула воды имеет уникальное строение. В ней удивительным образом сочетаются прочность и устойчивость кристаллической структуры (льда), и подвижность жидкого вещества. Исходя из качественного и количественного состава, значения электроотрицательности определите тип гибридизации, вид химической связи и геометрическую форму молекулы воды:

- 1) sp^3 - гибридизация
- 2) sp^2 - гибридизация
- 3) sp - гибридизация
- 4) тетраэдрическая форма
- 5) линейное строение
- 6) форма правильного треугольника
- 7) ковалентная полярная связь

8) ковалентная неполярная связь

9) ионная связь

Ответ: 1, 4, 7.

3. Аммиак (от латинского *Ammonia* – химический элемент) химическое соединение азота и водорода, при нормальных условиях – газ, без цвета, обладающий неприятным запахом в естественных условиях. Он легче воздушного потока, ядовит для живых организмов, отличается высоким коэффициентом растворимости в воде. Исходя из качественного и количественного состава, значения электроотрицательности определите тип гибридизации, вид химической связи и геометрическую форму молекулы аммиака:

1) sp^3 - гибридизация

2) sp^2 - гибридизация

3) sp - гибридизация

4) тетраэдрическая форма

5) линейное строение

6) форма правильного треугольника

7) ковалентная полярная связь

8) ковалентная неполярная связь

9) ионная связь

Ответ: 2, 6, 7.

4. При изучении темы «Химическая связь» учитель предложил ученикам из перечня веществ выбрать вещества, которых присутствует ковалентная полярная связь. На какие характеристики веществ необходимо ученикам обратить внимание при выборе:

1) растворимость (растворимо или нерастворимо)

2) природу вещества (органическое или неорганическое соединений)

3) электроотрицательность химических элементов

4) природу химических элементов (металл или неметалл)

5) класс, к которому принадлежит вещество

6) процесс диссоциации

Ответ: 3, 4.

5. Учитель предложил учащимся записать распределение электронов по атомным орбиталям для фторид иона. Каким правилом должны руководствоваться учащиеся при выполнении данного задания, какие ответы будут верными?

1) правила Клечковского

2) принцип Паули

3) правило Хунда

4) принцип наименьшей энергии

5) $1s^2 2s^2 2p^6$

6) $1s^2 2s^2 2p^5$

Ответ: 4, 5.

7. Тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы (проекты) по дисциплине не предусмотрены.

8. Оценочные средства для промежуточной аттестации

8.1. Компетенции и этапы формирования

Коды компетенций	Этапы формирования		
	Курс, семестр	Форма контроля	Модули (разделы) дисциплины
ПК-1	4 курс, Восьмой семестр	Зачет	Модуль 1: Строение веществ с точки зрения квантовой химии.

ПК-1	4 курс, Восьмой семестр	Зачет	Модуль 2: Образование химических связей с точки зрения квантовой химии.
------	-----------------------------------	-------	---

Сведения об иных дисциплинах, участвующих в формировании данных компетенций:

Компетенция ПК-1 формируется в процессе изучения дисциплин:

Адаптационные возможности растений, Аналитическая химия, Анатомия и морфология человека, Биогеография, Биологические основы сельского хозяйства, Биотехнологические производства Республики Мордовия, Биохимия, Ботаника, Введение в биотехнологию, Вторичные метаболиты растений, Генетика, Гистология, Зоология, Количественные расчеты по химии, Коллоидная химия, Лабораторный практикум по биохимии, Методика обучения биологии, Методика обучения химии, Методы приемы решения задач ЕГЭ по химии, Микробиология, Микроорганизмы и здоровье, Молекулярная биология, Молекулярные основы наследственности, Неорганический синтез, Общая и неорганическая химия, Общая экология, Органическая химия, Органический синтез, Основы антропологии, Основы биоорганической химии, Основы геоморфологии, Прикладная химия, Санитарная и пищевая микробиология, Современные подходы в обучении химии, Современные проблемы биотехнологии, Современные проблемы изучения генетики человека, Современные технологии в процессе преподавания химии, Социальная экология и рациональное природопользование, Теория эволюции, Физиология растений, Физиология человека, Физическая химия, Фитодизайн, Флористика, Химия высокомолекулярных соединений, Химия металлов, Химия неметаллов, Химия окружающей среды, Химия полимеров, Цитология, Этнокультурный компонент школьной биологии.

8.2. Показатели и критерии оценивания компетенций, шкалы оценивания

В рамках изучаемой дисциплины студент демонстрирует уровни овладения компетенциями:

Повышенный уровень:

знает и понимает теоретическое содержание дисциплины; творчески использует ресурсы (технологии, средства) для решения профессиональных задач; владеет навыками решения практических задач

Базовый уровень:

знает и понимает теоретическое содержание; в достаточной степени сформированы умения применять на практике и переносить из одной научной области в другую теоретические знания; умения и навыки демонстрируются в учебной и практической деятельности; имеет навыки оценивания собственных достижений; умеет определять проблемы и потребности в конкретной области профессиональной деятельности

Пороговый уровень:

понимает теоретическое содержание; имеет представление о проблемах, процессах, явлениях; знаком с терминологией, сущностью, характеристиками изучаемых явлений; демонстрирует практические умения применения знаний в конкретных ситуациях профессиональной деятельности

Уровень ниже порогового:

демонстрирует студент, обнаруживший пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допускающий принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий, не способный продолжить обучение или приступить к профессиональной деятельности по окончании вуза без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

Уровень сформированности и компетенции	Шкала оценивания для промежуточной аттестации		Шкала оценивания по БРС
	Экзамен (дифференцированный зачет)	Зачет	
Повышенный		зачтено	90 – 100%
Базовый		зачтено	76 – 89%
Пороговый		зачтено	60 – 75%
Ниже порогового		незачтено	Ниже 60%

Критерии оценки знаний студентов по дисциплине

Оценка	Показатели
Зачтено	Студент знает: теоретические основы современной квантовой химии; основные положения современной теории химической связи; взаимосвязь между электронной структурой и физико-химическими свойствами молекул; возможности основных современных квантово-химических расчетных методов и области их применимости. Демонстрирует умение грамотно решать задачи по строению молекул, выбирать оптимальные пути и методы решения теоретических задач; решать уравнение Шредингера и интерпретировать полученное решение для простейших молекулярных систем в приближении линейных комбинаций атомных орбиталей; обсуждать результаты исследований по квантовой химии, ориентироваться в современной литературе по квантовой химии. Ответ логичен и последователен, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы, выводы доказательны.
Незачтено	Студент демонстрирует незнание основного содержания дисциплины, обнаруживая существенные пробелы в знаниях учебного материала, допускает принципиальные ошибки в выполнении предлагаемых заданий; затрудняется делать выводы и отвечать на дополнительные вопросы преподавателя.

8.3. Вопросы, задания текущего контроля

Модуль 1: Строение веществ с точки зрения квантовой химии

ПК-1 готовностью реализовывать образовательные программы по учебным предметам в соответствии с требованиями образовательных стандартов

1. Дать определения понятиям «химический элемент», «атом». Привести темы школьного курса химии, в которых вводятся данные понятия. Указать на основе межпредметных связей с каким предметом начинается формирование данных понятий в курсе химии

2. Указать действия, которые учащиеся должны осуществить для выполнения заданий на количественную характеристику состава атома

3. Привести план характеристики элемента по его положению в периодической системе. Охарактеризовать по положению в периодической системе следующие химические элементы: а) калий, б) бериллий, в) серу

Сформулировать понятия, связанные с квантово-механическими представлениями, позволяющими в курсе школьной химии объяснить строение электронных оболочек атомов

4. Указать действия, которые учащиеся должны осуществить для выполнения заданий на строение электронных оболочек атомов Модуль 2: Образование химических связей с точки зрения квантовой химии.

ПК-1 готовностью реализовывать образовательные программы по учебным предметам в соответствии с требованиями образовательных стандартов

1. Сформулировать понятия, связанные с квантово-механическими и стереохимическими представлениями, позволяющие в курсе органической химии объяснить валентные состояния атома углерода. Описать модель атома углерода в sp^3 -, sp^2 -, s -гибридизации в молекулах и механизм процесса sp^3 -гибридизации. Охарактеризовать σ - π -связи

2. Привести методическую схему систематизации знаний о строении вещества.

3. Предложить таблицу, отражающую процесс образования ионов и процесс образования ионной связи, которую необходимо заполнить учащимся для актуализации знаний по теме «Изменение числа электронов на внешнем энергетическом уровне атомов химических элементов». Привести примеры.

4. Сравнить металлическую, ковалентную и ионную связи. По результатам сравнения предложить учащимся 8 класса таблицу для заполнения.

5. Предложить таблицу, отражающую процесс образования ионов и процесс образования ионной связи, которую необходимо заполнить учащимся для актуализации знаний по теме «Изменение числа электронов на внешнем энергетическом уровне атомов химических элементов». Привести примеры.

8.4. Вопросы промежуточной аттестации

Восьмой семестр (Зачет, ПК-1)

1. Привести краткие сведения об истории развития квантовой химии.
2. Привести основные понятия квантовой химии.
3. Описать методы квантовой химии.
4. Описать математический аппарат квантовой химии.
5. Привести стационарное уравнение Шредингера и функция Гамильтона.
6. Описать приближения, используемые при описании движения электрона в атоме водорода.
7. Описать два типа решения радиального уравнения Шредингера для атома H.
8. Привести понятие «атомная орбиталь», описать радиальные функции и радиальные функции распределения атома H и водородоподобных атомов.
9. Описать теорию строения атома Бора. Заряд ядра и порядковый номер элемента.
10. Описать квантовые числа.
11. Описать принципы заполнения атомных орбиталей.
12. Описать основные характеристики атомов.
13. Описать атомные спектры, спектр атома водорода: серии Лаймана, Бальмера и Пашена.
14. Описать основные характеристики химической связи.
15. Описать механизм образования химической связи, разработанный для молекулы водорода.
16. Привести классификацию и характеристику типов связи в зависимости от симметрии электронных облаков.
17. Описать спектральные методы исследования.
18. Описать основные положения метода ВС. Валентность.
19. Описать такую характеристику химической связи как «насыщаемость связи».
20. Описать такую характеристику химической связи как «прочность связи».
21. Описать такую характеристику химической связи как «полярность связи».
22. Описать такую характеристику химической связи как «направленность связи» и основные положения теории гибридизации.

23. Описать Sp -гибридизацию (на конкретных примерах).
24. Описать Sp^2 -гибридизацию (на конкретных примерах).
25. Описать Sp^3 -гибридизацию (на конкретных примерах).
26. Описать теорию пространственного строения молекул Гиллепси.
27. Описать геометрию молекул AH , AH_2 , AH_3 , AH_2E , AH_4 , AH_3E с точки зрения пространственного строения молекул Гиллепси.
28. Описать геометрию молекул AH_2E_2 , AH_5 , AH_4E , AH_3E_2 , AH_2E_3 , AH_6 , AH_5E , AH_4E_2 , с точки зрения пространственного строения молекул Гиллепси.
29. Описать сущность метода молекулярных орбиталей (ММО).
30. Описать принципы построения МО двухатомных гомоядерных молекул.
31. Описать принципы построения МО двухатомных гетероядерных молекул.
32. Дать сравнительную характеристику методов валентной связи и молекулярных орбиталей.
33. Описать характеристики ионной связи.
34. Описать металлическую связь.
35. Описать межмолекулярные взаимодействия.
36. Описать основные типы кристаллических решеток и взаимосвязь между типом химической связи, кристаллической решеткой и физическими свойствами соединения.
37. Описать типы изомерии комплексных соединений.
38. Описать строение комплексных соединений.
39. Описать строение координационных соединений с точки зрения метода валентных связей.
40. Описать строение координационных соединений с точки зрения ММО.
41. Описать энергетические диаграммы гомоядерных молекул и ионов.
42. Описать энергетические диаграммы гетероядерных молекул и ионов.
43. Какую информацию о строении и свойствах молекул можно извлечь из энергетических диаграмм МО.

8.5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета.

Зачет позволяет оценить сформированность компетенций, теоретическую подготовку студента, его способность к творческому мышлению, готовность к практической деятельности, приобретенные навыки самостоятельной работы, умение синтезировать полученные знания и применять их при решении практических задач.

При балльно-рейтинговом контроле знаний итоговая оценка выставляется с учетом набранной суммы баллов.

Собеседование (устный ответ) на зачете

Для оценки сформированности компетенции посредством собеседования (устного ответа) студенту предварительно предлагается перечень вопросов или комплексных заданий, предполагающих умение ориентироваться в проблеме, знание теоретического материала, умения применять его в практической профессиональной деятельности, владение навыками и приемами выполнения практических заданий.

При оценке достижений студентов необходимо обращать особое внимание на:

- усвоение программного материала;
- умение излагать программный материал научным языком;
- умение связывать теорию с практикой;
- умение отвечать на видоизмененное задание;
- владение навыками поиска, систематизации необходимых источников литературы по изучаемой проблеме;

- умение обосновывать принятые решения;
- владение навыками и приемами выполнения практических заданий;
- умение подкреплять ответ иллюстративным материалом.

Тесты

При определении уровня достижений студентов с помощью тестового контроля необходимо обращать особое внимание на следующее:

- оценивается полностью правильный ответ;
- преподавателем должна быть определена максимальная оценка за тест, включающий определенное количество вопросов;
- преподавателем может быть определена максимальная оценка за один вопрос теста;

Подготовлено в системе 1С:Университет (000000736)

– по вопросам, предусматривающим множественный выбор правильных ответов, оценка определяется исходя из максимальной оценки за один вопрос теста.

Письменная контрольная работа

Виды контрольных работ: аудиторные, домашние, текущие, экзаменационные, письменные, графические, практические, фронтальные, индивидуальные. Система заданий письменных контрольных работ должна:

- выявлять знания студентов по определенной дисциплине (разделу дисциплины);
- выявлять понимание сущности изучаемых предметов и явлений, их закономерностей;
- выявлять умение самостоятельно делать выводы и обобщения;
- творчески использовать знания и навыки.

Требования к контрольной работе по тематическому содержанию соответствуют устному ответу.

Также контрольные работы могут включать перечень практических заданий.

Контекстная учебная задача, проблемная ситуация, ситуационная задача, кейсовое задание

При определении уровня достижений студентов при решении учебных практических задач необходимо обращать особое внимание на следующее:

- способность определять и принимать цели учебной задачи, самостоятельно и творчески планировать ее решение как в типичной, так и в нестандартной ситуации;
- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам программы;
- точное использование научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы и задания;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его эффективно использовать в постановке и решении учебных задач;
- грамотное использование основной и дополнительной литературы;
- умение использовать современные информационные технологии для решения учебных задач, использовать научные достижения других дисциплин;
- творческая самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, активное участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

9. Перечень основной и дополнительной учебной литературы Основная литература

1. Глинка, Н. Л. Общая химия [Текст] : учеб. для бакалавров / Н. Л. Глинка. – 19-е изд., перераб. и доп. – М. : Юрайт, 2013. – 900 с.

2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учеб. пособие / А. И. Ермаков. – М. : Юрайт, 2014. – 555 с.

3. Крашенинин, В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. – Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>

Дополнительная литература

Подготовлено в системе 1С:Университет (000000736)

1. Грандберг, И. И. Органическая химия [Текст] : учеб. для бакалавров / И. И. Грандберг, Н. Л. Нам. – 8-е изд. – М. : Юрайт, 2013. – 608 с.

2. Афонина, Л.И. Неорганическая химия : учебное пособие / Л.И. Афонина, А.И. Апарнев, А.А. Казакова. – Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2013. – 104 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=228823> . – ISBN 978-5-7782-2172-7. – Текст : электронный.

10. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://www.alhimik.ru> - Alhimik. Полезные советы, опыты, химические новости виртуальный репетитор, история химии.

11. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины (модуля)

При освоении материала дисциплины необходимо:

- спланировать и распределить время, необходимое для изучения дисциплины;
- конкретизировать для себя план изучения материала;
- ознакомиться с объемом и характером внеаудиторной самостоятельной работы для полноценного освоения каждой из тем дисциплины.

Сценарий изучения курса:

- проработайте каждую тему по предлагаемому ниже алгоритму действий;
- изучив весь материал, выполните итоговый тест, который продемонстрирует готовность к сдаче зачета.

Алгоритм работы над каждой темой:

- изучите содержание темы вначале по лекционному материалу, а затем по другим источникам;
- прочитайте дополнительную литературу из списка, предложенного преподавателем;
- выпишите в тетрадь основные категории и персоналии по теме, используя лекционный материал или словари, что поможет быстро повторить материал при подготовке к зачету;
- составьте краткий план ответа по каждому вопросу, выносимому на обсуждение на лабораторном занятии;
- выучите определения терминов, относящихся к теме;
- продумайте примеры и иллюстрации к ответу по изучаемой теме;
- подберите цитаты ученых, общественных деятелей, публицистов, уместные с точки зрения обсуждаемой проблемы;
- продумывайте высказывания по темам, предложенным к лабораторному занятию.

Рекомендации по работе с литературой:

- ознакомьтесь с аннотациями к рекомендованной литературе и определите основной метод изложения материала того или иного источника;
- составьте собственные аннотации к другим источникам на карточках, что поможет при подготовке рефератов, текстов речей, при подготовке к зачету;
- выберите те источники, которые наиболее подходят для изучения конкретной темы

12. Перечень информационных технологий

Реализация учебной программы обеспечивается доступом каждого студента к информационным ресурсам – электронной библиотеке и сетевым ресурсам Интернет. Для использования ИКТ в учебном процессе используется программное обеспечение, позволяющее осуществлять поиск, хранение, систематизацию, анализ и презентацию информации, экспорт информации на цифровые носители, организацию взаимодействия в реальной и виртуальной образовательной среде.

Индивидуальные результаты освоения дисциплины студентами фиксируются в электронной информационно-образовательной среде университета.

12.1 Перечень программного обеспечения

1. Microsoft Windows 7 Pro
2. Microsoft Office Professional Plus 2010
3. 1С: Университет ПРОФ

12.2 Перечень информационных справочных систем (обновление выполняется еженедельно)

1. Информационно-правовая система «ГАРАНТ» (<http://www.garant.ru>)
2. Справочная правовая система «КонсультантПлюс» (<http://www.consultant.ru>)

12.3 Перечень современных профессиональных баз данных

1. Профессиональная база данных «Открытые данные Министерства образования и науки РФ» (<http://xn----8sblcdzzacvuc0jbg.xn--80abucjiibhv9a.xn--p1ai/opendata/>)
2. Профессиональная база данных «Портал открытых данных Министерства культуры Российской Федерации» (<http://opendata.mkrf.ru/>)
3. Электронная библиотечная система Znanium.com(<http://znanium.com/>)
4. Научная электронная библиотека e-library(<http://www.e-library.ru/>)

13. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Для проведения аудиторных занятий необходим стандартный набор специализированной учебной мебели и учебного оборудования, а также мультимедийное оборудование для демонстрации презентаций на лекциях. Для проведения практических занятий, а так-же организации самостоятельной работы студентов необходим компьютерный класс с рабочими местами, обеспечивающими выход в Интернет.

При изучении дисциплины используется интерактивный комплекс Flipbox для проведения презентаций и видеоконференций, система iSpring в процессе проверки знаний по электронным тест-тренажерам.

Индивидуальные результаты освоения дисциплины фиксируются в электронной информационно-образовательной среде университета.

Реализация учебной программы обеспечивается доступом каждого студента к информационным ресурсам – электронной библиотеке и сетевым ресурсам Интернет. Для использования ИКТ в учебном процессе необходимо наличие программного обеспечения, позволяющего осуществлять поиск информации в сети Интернет, систематизацию, анализ и презентацию информации, экспорт информации на цифровые носители.

1. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, № 15

Помещение укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами обучения

Основное оборудование:

Наборы демонстрационного оборудования: автоматизированное рабочее место в составе (УМК трибуна, проектор, лазерная указка, маркерная доска); колонки SVEN.

Учебно-наглядные пособия:

Презентации

Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Windows 7 Pro
- Microsoft Office Professional Plus 2010
- 1С: Университет ПРОФ

2. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, № 12.

Лаборатория физической и коллоидной химии

Помещение укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами обучения.

Основное оборудование:

Наборы демонстрационного оборудования: автоматизированное рабочее место в составе (системный блок, монитор, клавиатура, мышь).

Лабораторное оборудование: весы технические; набор гирь; аквадистиллятор; калориметр; муфельная печь; термометр Бекмана; фотоэлектроколориметр; электроплитка ЭПТ-1; экран настенный; штатив лабораторный; штатив лабораторный; РМС – Х «Кинетика 2»; РМС – Х «Колориметрия»; РМС – Х «Кондуктометрия»; РМС – Х «рН-метрия»; РМС–Х «Тепловые эффекты»; МС – Х «Электрохимия 2»; баня водяная; кондуктометр; электроплита; баня комбинированная;; фотометр «Эксперт-003»; аппарат определения состояния нефтепродуктов.

Специализированная мебель:

стулья винтовые; столы лабораторные; шкаф вытяжной; шкаф для приборов.

Учебно-наглядные пособия:

Презентации, набор таблиц по химии (Периодическая система химических элементов Д. И. Менделеева, Таблица растворимости, Электрохимический ряд напряжения металлов).

Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Windows 7 Pro
- Microsoft Office Professional Plus 2010
- 1С: Университет ПРОФ

3. Помещение для самостоятельной работы, № 11

Помещение укомплектовано специализированной мебелью и техническими средствами обучения.

Основное оборудование:

Автоматизированное рабочее место в составе (в составе: персональный компьютер) с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

Учебно-наглядные пособия:

Методические рекомендации «Методические рекомендации по организации аудиторной и внеаудиторной работы студентов естественно-технологического факультета».

Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Windows 7 Pro
- Microsoft Office Professional Plus 2010
- 1С: Университет ПРОФ