Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор
_____Хагуров Т.А.
«_02_» ___июня___ 2026 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.32 КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

Специальность	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Направленность (профиль)	Органическая и медицинская химия
Форма обучения	очная
Квалификация	химик

Краснодар 2026

Рабочая программа дисциплины: **Квантовая химия и строение молекул** составлена в соответствии с федеральным государственным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия.

Программу составил: доцент, к.х.н. Зеленов В.И.

Рабочая программа дисциплины: **Квантовая химия и строение молекул**

утверждена на заседании кафедры ОНХ и ИВТ в химии
протокол №10 «27» апреля 2026 г.

Заведующий кафедрой Волынкин В.А.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета
протокол №7 «29» апреля 2026 г.

Председатель УМК факультета Беспалов А.В.

Рецензенты: Кононенко Н.А., д.х.н., проф. КубГУ
Петров Н.Н., к.х.н., Генеральный директор ООО «Интеллектуальные технологии»

1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля)

1.1 Цель освоения дисциплины

Формирование готовности к профессиональной деятельности, связанной с прогнозированием свойств веществ и механизмов протекания химических процессов на основе данных о структуре вещества и фундаментальных положений квантовомеханической теории, в соответствии с компетентностным подходом.

1.2 Задачи дисциплины

- Овладение системой фундаментальных химических понятий в области квантовой химии и строения вещества, необходимых в дальнейшей профессиональной деятельности;
- Раскрытие роли современных теорий, описывающих строение вещества, как основы теоретической и экспериментальной химии;
- Формирование умения применять теоретические знания в области строения вещества для решения практических задач дальнейшей профессиональной деятельности.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Квантовая химия и строение молекул» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана.

Изучению дисциплины предшествует изучение дисциплин:
«Математика» и «Неорганическая химия». Данная дисциплина является предшествующей для дисциплины «Органическая химия».

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся общепрофессиональной компетенции (ОПК):

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	
ИОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	*знает* базовые законы физики и математики, используемые в области строения вещества, необходимые для планирования работ химической направленности
	умеет использовать базовые законы физики и математики, используемые в области строения вещества, для планирования работ химической направленности
	владеет способами применения базовых законов физики и математики, используемых в области строения вещества, необходимых для планирования работ химической направленности

ИОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	*знает* стандартные методы обработки данных с использованием аппроксимации численных характеристик
	Умеет использовать основные методы обработки данных с использованием аппроксимации численных характеристик
	владеет методами обработки данных с использованием стандартных приемов аппроксимации численных характеристик, необходимыми при решении задач, возникающих при изучении строения вещества
ИОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	*знает* базовые законы и представления физики, необходимые в области строения вещества
	умеет интерпретировать результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений
	владеет методами интерпретации результатов химических наблюдений, полученных в области строения вещества, с использованием физических законов и представлений

Результаты обучения по дисциплине достигаются в рамках осуществления всех видов контактной и самостоятельной работы обучающихся в соответствии с утвержденным учебным планом.

Индикаторы достижения компетенций считаются сформированными при достижении соответствующих им результатов обучения.

2 Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц (216 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр (часы)	
		5	6
Контактная работа, в том числе:			
Аудиторные занятия (всего):	**102**	**102**	**-**
занятия лекционного типа	34	34	-
лабораторные занятия	34	34	
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)	34	34	
Иная контактная работа:			-
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	-
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,3	0,3	-
Самостоятельная работа, в том числе:	**76**	**76**	
Курсовая работа	-	-	-

Проработка учебного (теоретического) материала		40	40	
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		-	-	-
Реферат		10	10	-
Подготовка к текущему контролю		26	26	-
Контроль		**35,7**	**35,7**	-
Подготовка к экзамену		35,7	35,7	-
Общая трудоемкость	**час.**	216	216	-
	в том числе контактная работа	104,2	104,2	-
	зач. ед.	6	6	-

2.2 Содержание дисциплины

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 4 семестре (очная форма обучения)

№	Наименование разделов(тем)	Кол-во часов				
		всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1	Квантовомеханическая теория строения вещества	46	10	8	8	20
2	Симметрия молекул	34	6	4	4	20
3	Энергетические аспекты строения молекул. Электрические и магнитные свойства веществ	62	10	16	16	20
4	Строение вещества в конденсированном состоянии	36	8	6	6	16
ИТОГО по разделам дисциплины		216	34	34	34	76
Контроль самостоятельной работы (КСР)		2				
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2				
Подготовка к текущему контролю		26,1	-	-	-	-
Общая трудоемкость по дисциплине		216				

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела (темы)	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Квантово-механическая теория строения вещества	Математический аппарат квантовой механики. Операторы, собственные функции и собственные значения. Оператор Гамильтона. Соотношение неопределенности. Уравнение Шредингера. Основные постулаты квантовой химии. Задачи о свободном движении частицы, движении частицы в потенциальном ящике. Гармонический осциллятор. Эмпирические и полуэмпирические методы в квантовой химии.	устный опрос
2.	Симметрия молекул	Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления. Классификация атомов и молекул. Параметры, определяющие геометрию молекулы, межъядерные расстояния, валентные углы. Внутренние вращения молекул. Понятие конформации молекул. Шахматные и затененные конфигурации.	устный опрос
3.	Энергетические аспекты теории строения вещества. Электрические и магнитные свойства веществ	Энергетический критерий существования некоторой совокупности эффективных атомов как единой частицы – молекулы. Энергия образования молекул из свободных атомов. Парциальные энергии отдельных видов химической связи одного вида в любых молекулах. Энергия образования молекулы. Постоянство энергии связей одного вида в молекулах. Энергия стабилизации кристаллическим полем, как эффект влияния строения молекул на их свойства. Электрический дипольный момент в классической теории и квантовой механике. Полярные и неполярные вещества. Дипольный момент и изомерия молекул. Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов.	реферат

		Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный момент и поляризуемость молекул. Средняя поляризуемость, анизотропия поляризуемости. Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками вещества. Молярная рефракция. Эмпирическая схема расчета рефракций. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекул в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Ферромагнетизм. Зеемановские уровни энергии. Условия ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и его интерпретация. ЭПР. Парамагнитные частицы. Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Межмолекулярное взаимодействие. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии. Электронные состояния, колебательные состояния, вращательные состояния. Вращательные, колебательные и электронные спектры. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов как основа интерпретации спектров комплексных соединений. Правила отбора. Значение молекулярных спектров для решения практических задач химической науки.	
4.	Строение вещества в конденсированном состоянии	Структурная классификация конденсированных фаз. Диаграммы состояния. Мгновенная колебательно-усредненная структура жидкостей. Современные способы описания структуры жидкостей. Аморфные вещества. Жидкие кристаллы (холестерики, нематики и пр.). Идеальные кристаллы. Особенности ультрадисперсного состояния веществ. Структура границы раздела конденсированных фаз.	устный опрос

2.3.2 Занятия семинарского типа (практические / семинарские занятия / лабораторные работы)

№	Наименование раздела (темы)	Тематика занятий/работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Квантово-механическая теория строения вещества	Математический аппарат квантовой химии. Операторы, собственные функции и собственные значения. Основные постулаты квантовой химии. Уравнение Шредингера. Задачи о свободном движении частицы, движении частицы потенциальном ящике. Эмпирические и полуэмпирические методы в квантовой хи мии.	устный опрос
2.	Симметрия молекул	Симметрия равновесной геометрической конфи-гурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления.	устный опрос
3.	Энергетические аспекты теории строения вещества. Электрические и магнитные свойства веществ	Энергия образования молекулы. Энергия стабилизации кристаллическим полем как эффект влияния строения молекул на их свойства. Электрический дипольный момент в классической теории и квантовой механике. Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов. Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками вещества. Молярная рефракция. Эмпирическая схема расчета рефракций. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекул в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Ферромагнетизм. ЯМР-спектроскопия. Условия ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг. Релаксационные явления. Шифт-реагенты. Химический сдвиг и его интерпретация. ЭПР. Парамагнитные частицы.	реферат

		Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии. Вращательные, колебательные и электронные спектры. Правила отбора. Значение молекулярных спектров для решения практических задач химической науки.	
4.	Строение вещества в конденсированном состоянии	Диаграммы состояния. Структура и свойства жидкостей, структура твёрдого тела. Зонная теория проводимости. Жидкие кристаллы. Особенности ультрадисперсного состояния веществ. Межмолекулярное взаимодействие. Комплексные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов.	устный опрос

2.3.3 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.

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

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Проработка учебного (теоретического) материала	1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.) - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-00101-502-4. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104#book_name 2. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 236 с. - https://e.lanbook.com/book/90007#authors. 3. Сизова, О.В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Сизова, Н.В. Иванова, А.А. Ванин. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2021. - 276 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2173-2. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/76285#book_name

		4. Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2- е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с. - (Учебники и учебные пособия). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5222001067 5. Журнал общей химии 6. Журнал неорганической химии 7. Журнал физической химии
2	Реферат	1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.) - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-00101-502-4. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104#book_name 2. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 236 с. - https://e.lanbook.com/book/90007#authors. 3. Сизова, О.В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Сизова, Н.В. Иванова, А.А. Ванин. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2021. - 276 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2173-2. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/76285#book_name 4. Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2- е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с. - (Учебники и учебные пособия). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5222001067 5. Журнал общей химии 6. Журнал неорганической химии 7. Журнал физической химии

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме с увеличенным шрифтом.Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3 Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины (модуля)

В учебном процессе по дисциплине «Строение вещества» используются консервативные (лекции), репродуктивные (практические занятия) и творческие (подготовка рефератов) педагогические технологии.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья используются образовательные технологии, позволяющие полностью индивидуализировать содержание, методы и темпы учебной деятельности, вносить вовремя необходимые коррективы как в деятельность студента инвалида, так и в деятельность преподавателя.

4 Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «Строение вещества».

Оценочные средства включают контрольные материалы для проведения **текущего контроля** в форме вопросов, заданий и тем для самостоятельной работы и **промежуточной аттестации** в форме вопросов и заданий для подготовки к зачету.

Структура оценочных средств для текущей и промежуточной аттестации

№ п/п	Код и наименование индикатора (в соответствии с п. 1.4)	Результаты обучения (в соответствии с п. 1.4)	Наименование оценочного средства	
			Текущий контроль	Промежуточная аттестация
1	ИОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	*знает* базовые законы физики и математики, используемые в области строения вещества, необходимые для планирования работ химической направленности.	устный опрос	экзамен
		умеет использовать базовые законы физики и математики, используемые в области строения вещества, для планирования работ химической направленности.		

		владеет способами применения базовых законов физики и математики, используемых в области строения вещества, необходимых для планирования работ химической направленности.		
2	ИОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	*знает* стандартные методы обработки данных с использованием аппроксимации численных характеристик.	устный опрос	экзамен
		умеет использовать основные методы обработки данных с использованием аппроксимации численных характеристик		
		владеет методами обработки данных с использованием стандартных приемов аппроксимации численных характеристик, необходимыми при решении задач, возникающих при изучении строения вещества.		
3	ИОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	*знает* базовые законы и представления физики, необходимые в области строения вещества.	реферат	экзамен
		умеет интерпретировать результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений		
		владеет методами интерпретации результатов химических наблюдений, полученных в области строения вещества, с использованием физических законов и представлений.		

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Вопросы и задания для текущего контроля

1. В чём заключается разница понятий функция, функционал, оператор? (ОПК-4)
2. Сформулируйте понятие коммутатора операторов (ОПК-4).
3. Какие операторы называют Эрмитовыми? (ОПК-4)
4. Что такое операторные уравнения? (ОПК-4)
5. Какие функции называют собственными? (ОПК-4)
6. Определите понятие «Собственные значения» (ОПК-4).
7. В чем сущность термина «Вырождение функций»? (ОПК-4)
8. Какие операторы квантовой механики Вам известны? (ОПК-4)
9. Оператор Гамильтона (ОПК-4).
10. Запишите выражение оператора набла (ОПК-4).
11. Запишите выражение принципа неопределенности (ОПК-4).
12. Перечислите основные постулаты квантовой механики (ОПК-4).
13. Запишите уравнение Шредингера (ОПК-4).
14. В чём преимущество использования сферических координат при решении квантовомеханических задач? (ОПК-4)
15. Почему для атома водорода и водородоподобного атома могут быть получены точные волновые функции путем прямого решения уравнения Шредингера? (ОПК-4)
16. Объясните сущность метода Хартри-Фока (ОПК-4).
17. АО Слэтера-Зеннера (ОПК-4).
18. Термы многоэлектронных атомов (ОПК-4).
19. Система термов (ОПК-4).
20. Правила Пфёнда для определения основного терма (ОПК-4).
21. Эффект Зеемана (ОПК-4).
22. LS и JJ-связь (ОПК-4).
23. Приближение Борна-Оппенгеймера (ОПК-4).
24. Метод Гайтлера-Лондона (ОПК-4).
25. Метод МО ЛКАО (ОПК-4).
26. Уравнение Рутаана (ОПК-4).
27. Полуэмпирические методы в квантовой химии (ОПК-4).
28. Метод Хюккеля (ОПК-4).
29. Метод Фроста (ОПК-4).
30. Ароматичность и антиароматичность (ОПК-4).
31. Коммутируют ли операторы A и B если A= x; B= y? (ОПК-4)
32. Линеен ли оператор A= x^2? (ОПК-4)
33. Докажите линейность оператора d/dx (ОПК-4).
34. Докажите, что оператор ι d/dx линеен и эрмитов (ОПК-4).

35. Удовлетворяет ли функция exp(ax**)** уравнению **L**f =Lf, если **L** = d^2/dx^2? (ОПК-4)
36. Оцените коэффициент прозрачности потенциального барьера, если: D0 ≈ 1, U0-E =10^{-18}Дж, μ=10^{-30} кг, l=10^{-10}м (ОПК-4).
37. В рамках JJ-связи установите термы для электронной конфигурации sp (ОПК-4).
38. Установите все возможные термы для системы из двух p-электронов, выберите на основании известных Вам правил основной терм (используйте схему Рассела- Саундерса) (ОПК-4).
39. Определите константу экранирования S для АО 1s,2p,3p атома хлора (ОПК-4).
40. Определите эффективный заряд ядра для 6s электрона атома гадолиния (ОПК-4).
41. Используя МОХ, постройте диаграмму энергетических уровней π-МО и схемы их заполнения электронами для циклопропенильной системы (случаи катиона, радикала и аниона) (ОПК-4).
42. Используя графический метод Фроста определите энергетические уровни циклопентадиенила и бензола (ОПК-4).
43. Перечислите основные элементы симметрии молекул (ОПК-4).
44. Дайте определение понятию «группа» (ОПК-4).
45. Что такое точечная группа симметрии? (ОПК-4)
46. Определите операцию умножения для точечной группы симметрии (ОПК-4).
47. Каким образом можно отличить абелевы и неабелевы группы? (ОПК-4)
48. Какие группы симметрии наиболее характерны для молекул? (ОПК-4)
49. К какой группе симметрии можно отнести гомоядерные двухатомные молекулы? (ОПК-4)
50. К какой группе симметрии можно отнести гетероядерныедвухатомные молекулы? (ОПК-4)
51. Что называют характером группы? (ОПК-4)
52. Дайте определение термина «Представление группы» (ОПК-4).
53. Какие представления относят к неприводимым? (ОПК-4)
54. Какие представления обозначаются tg? (ОПК-4)
55. Какие представления обозначаются b1? (ОПК-4)
56. Какие представления обозначаются a1? (ОПК-4)
57. Какие представления обозначаются e? (ОПК-4)
58. Определите элементы симметрии и группу симметрии молекулы аммиака (ОПК- 4).
59. Постройте таблицу умножения для элементов симметрия молекулы аммиака (ОПК-4).
60. Постройте квадрат Кэли для группы C2v (ОПК-4).
61. Охарактеризуйте преобразование p-орбиталей при операциях симметрии группы C2v(ОПК-4).
62. Охарактеризуйте преобразование d-орбиталей при операциях симметрии группы C2v (ОПК-4).

63. Определите характеры неприводимых представлений группы C2v в базисе p- орбиталей(ОПК-4).
64. Определите характеры неприводимых представлений группы C2v в базисе d- орбиталей(ОПК-4).
65. Чемуравно число неприводимых представлений группы? (ОПК-4)
66. Приведите примеры молекул с группой симметрии D3h (ОПК-4).
67. Приведите примеры молекул с группой симметрии D5h (ОПК-4).
68. Приведите примеры аморфных веществ (ОПК-4).
69. Какие свойства являются необходимым признаком кристалла? (ОПК-4)
70. Какие теории строения жидкости Вам известны? (ОПК-4)
71. Дайте определение термину «Молярная рефракция» (ОПК-4) При каких обстоятельствах были открыты мезоморфные свойства веществ? (ОПК-4)
72. Какую форму молекул имели жидкокристаллические вещества, открытые Рейнитцером? (ОПК-4)
73. В чем разница между лиотропными и термотропными жидкокристаллическими веществами? (ОПК-4)
74. В литературе распространен термин «дискотики», что он обозначает? (ОПК-4)
75. В каких целях используется явление экзальтации рефракции? (ОПК-4)
76. Что понимают под термином «жидкокристаллическое термопокрывало»? (ОПК-4)

Задания

При 293К плотность a%-го раствора вещества А в воде равна d г/см^3, показатель преломления n. Вычислите молярную рефракцию вещества а, если для воды плотность составляет 1,000г/см^3, а показатель преломления – 1,333 (ОПК-4).

№	a%	Вещество А	d	n
78.	31,000	HCl	1,157	1,407
79.	30,000	H_2SO_4	1,220	1,370
80.	40,012	$HClO_3$	1,293	1,367
81.	17,034	LiBr	1,129	1,362
82.	35,002	LiCl	1,174	1,414
83.	24,501	NaCl	1,187	1,377
84.	12,505	Na_2SO_4	1,116	1,352
85.	9,0401	K_2SO_4	1,075	1,345
86.	44,012	$C_{12}H_{22}O_{11}$	1,191	1,406
87.	44,023	$CO(NH_2)_2$	1,121	1,400

88. Дипольный момент. Полярные и неполярные вещества (ОПК-4).
89. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов (ОПК-4).
90. Магнитный момент и магнитная восприимчивость веществ (ОПК-4).
91. Методы ЭПР и ЯМР (ОПК-4).
92. Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии (ОПК-4).
93. Молекулярные спектры. Правила отбора (ОПК-4).

94. Энергетические критерии существования молекул (ОПК-4).
95. Дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействие (ОПК-4).
96. Энергия химических связей и методы её определения (ОПК-4).
97. Эксимеры и эксиплексы (ОПК-4).
98. Теория кристаллического поля (ОПК-4).
99. Спектрохимический ряд (ОПК-4).
100. Теорема Яна-Теллера (ОПК-4).

Примерные темы рефератов

1. Силы Ван-дер-Ваальса (ОПК-4).
2. Раман-спектроскопия и её применение в исследовании химических веществ (ОПК-4).
3. Спектры люминисценции (ОПК-4).
4. Магнитная восприимчивость веществ. Ферромагнетизм. Антиферромагнетизм. Ферримагнетики (ОПК-4).
5. Молекулярные магниты и перспективы их использования (ОПК-4).
6. Ориентационное и дисперсионное взаимодействия и их влияние на свойства веществ(ОПК-4).
7. Методы определения дипольных моментов химических соединений (ОПК-4).
8. ЭПР-спектроскопия и её применение к решению структурно-химических задач (ОПК-4).
9. Энергия химических связей и методы её определения (ОПК-4).
10. Эксимеры и эксиплексы (ОПК-4).
11. Спектроскопия ЯМР-высокого разрешения в исследовании структуры органическихвеществ (ОПК-4).
12. ИК-спектроскопия. Применение ИК-спектров в качественном и количественноманализе (ОПК-4).
13. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ОПК-4).

Зачетно-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации (экзамен)

Вопросы для подготовки к экзамену

1. В чём заключается разница понятий функция, функционал, оператор?
2. Сформулируйте понятие коммутатора операторов.
3. Какие операторы называют Эрмитовыми?
4. Что такое операторные уравнения?
5. Какие функции называют собственными?
6. Определите понятие «Собственные значения».
7. В чем сущность термина «Вырождение функций»?
8. Какие операторы квантовой механики Вам известны?
9. Оператор Гамильтона.

10. Запишите выражение оператора набла.
11. Запишите выражение принципа неопределенности.
12. Перечислите основные постулаты квантовой механики.
13. Запишите уравнение Шредингера.
14. В чём преимущество использования сферических координат при решении квантовомеханических задач?
15. Почему для атома водорода и водородоподобного атома могут быть получены точные волновые функции путем прямого решения уравнения Шредингера?
16. Объясните сущность метода Хартри-Фока.
17. АО Слэтера-Зеннера.
18. Термы многоэлектронных атомов.
19. Система термов.
20. Правила Пфёнда для определения основного терма.
21. Эффект Зеемана.
22. LS и JJ-связь.
23. Приближение Борна-Оппенгеймера.
24. Метод Гайтлера-Лондона.
25. Метод МО ЛКАО.
26. Уравнение Рутаана.
27. Полуэмпирические методы в квантовой химии.
28. Метод Хюккеля.
29. Метод Фроста.
30. Ароматичность и антиароматичность.
31. Коммутируют ли операторы А и В если А= x; В= y?
32. Линеен ли оператор $A= x^2$?
33. Докажите линейность оператора d/dx.
34. Докажите, что оператор ι d/dx линеен и эрмитов.
35. Удовлетворяет ли функция exp(ax**)** уравнению **L**f =Lf, если **L** = d^2/dx^2?
36. Оцените коэффициент прозрачности потенциального барьера, если: D0 ≈ 1, U0-E =10^{-18} Дж, μ=10^{-30} кг, l=10^{-10}м.
37. В рамках JJ-связи установите термы для электронной конфигурации sp.
38. Установите все возможные термы для системы из двух p-электронов, выберите на основании известных Вам правил основной терм (используйте схему Рассела-Саундерса).
39. Определите константу экранирования S для АО 1s,2p,3p атома хлора.
40. Определите эффективный заряд ядра для 6s электрона атома гадолиния.
41. Используя МОХ, постройте диаграмму энергетических уровней π-МО и схемы их заполнения электронами для циклопропенильной системы (случаи катиона, радикалаи аниона).
42. Используя графический метод Фроста определите энергетические уровни циклопентадиенила и бензола.
43. Перечислите основные элементы симметрии молекул.
44. Дайте определение понятию «группа».

45. Что такое точечная группа симметрии?
46. Определите операцию умножения для точечной группы симметрии.
47. Каким образом можно отличить абелевы и неабелевы группы?
48. Какие группы симметрии наиболее характерны для молекул?
49. К какой группе симметрии можно отнести гомоядерные двухатомные молекулы?
50. К какой группе симметрии можно отнести гетероядерные двухатомные молекулы?
51. Что называют характером группы?
52. Дайте определение термина «Представление группы».
53. Какие представления относят к неприводимым?
54. Какие представления обозначаются tg?
55. Какие представления обозначаются b1?
56. Какие представления обозначаются a1?
57. Какие представления обозначаются e?
58. Определите элементы симметрии и группу симметрии молекулы аммиака.
59. Постройте таблицу умножения для элементов симметрия молекулы аммиака.
60. Постройте квадрат Кэли для группы C2v
61. Охарактеризуйте преобразование p-орбиталей при операциях симметрии группы C2v
62. Охарактеризуйте преобразование d-орбиталей при операциях симметрии группы C2v
63. Определите характеры неприводимых представлений группы C2v в базисе p- орбиталей.
64. Определите характеры неприводимых представлений группы C2v в базисе d- орбиталей.
65. Чемуравно число неприводимых представлений группы?
66. Приведите примеры молекул с группой симметрии D3h
67. Приведите примеры молекул с группой симметрии D5h
68. Приведите примеры аморфных веществ.
69. Какие свойства являются необходимым признаком кристалла?
70. Какие теории строения жидкости Вам известны?
71. Дайте определение термину «Молярная рефракция»
72. При каких обстоятельствах были открыты мезоморфные свойства веществ?
73. Какую форму молекул имели жидкокристаллические вещества, открытые Рейнитцером?
74. В чем разница между лиотропными и термотропными жидкокристаллическими веществами?
75. В литературе распространен термин «дискотики», что он обозначает?
76. В каких целях используется явление экзальтации рефракции?
77. Что понимают под термином «жидкокристаллическое термопокрывало»?

Задания

При 293К плотность a%-го раствора вещества А в воде равна d г/см^3, показатель преломления n. Вычислите молярную рефракцию вещества а, если для воды плотность составляет 1,000г/см^3, а показатель преломления – 1,333.

№	a%	Вещество А	d	n
78.	31,000	HCl	1,157	1,407
79.	30,000	H_2SO_4	1,220	1,370
80.	40,012	$HClO_3$	1,293	1,367
81.	17,034	LiBr	1,129	1,362
82.	35,002	LiCl	1,174	1,414
83.	24,501	NaCl	1,187	1,377
84.	12,505	Na_2SO_4	1,116	1,352
85.	9,0401	K_2SO_4	1,075	1,345
86.	44,012	$C_{12}H_{22}O_{11}$	1,191	1,406
87.	44,023	$CO(NH_2)_2$	1,121	1,400

88. Дипольный момент. Полярные и неполярные вещества.
89. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов.
90. Магнитный момент и магнитная восприимчивость веществ.
91. Методы ЭПР и ЯМР.
92. Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии.
93. Молекулярные спектры. Правила отбора.
94. Энергетические критерии существования молекул.
95. Дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействие.
96. Энергия химических связей и методы её определения.
97. Эксимеры и эксиплексы.
98. Теория кристаллического поля.
99. Спектрохимический ряд.
100. Теорема Яна-Теллера.

Критерии оценивания результатов обучения

Критерий	**Оценка**	**Уровень**
Студент при выполнении заданий в области теории строения молекул, направленных на контроль освоения компетенций, указанных в РПД, показал знания, необходимые для решения поставленной задачи. Выполненные квантовомеханические расчеты базируются на глубоком знании соответствующих разделов математики, их результаты не имеют значительных погрешностей, а выводы соответствуют полученным результатам. При ответах на дополнительные вопросы студент не испытывает затруднений и способен сформулировать четкие	отлично	сформи-рован

однозначные ответы. Студент знаком с дополнительной литературой.		
Студент при выполнении заданий в области теории строения молекул, направленных на контроль освоения компетенций, указанных в РПД, показал знания, необходимые для решения поставленной задачи. Выполненные квантовомеханические расчеты базируются на глубоком знании соответствующих разделов математики, их результаты не имеют значительных погрешностей, а выводы соответствуют полученным результатам. При ответах на дополнительные вопросы студент не испытывает затруднений, способен сформулировать четкие однозначные ответы.	хорошо	сформирован
Студент при выполнении заданий в области теории строения вещества, направленных на контроль освоения компетенций, указанных в РПД, испытывал затруднения, не мог дать однозначных ответов на все поставленные вопросы, но показал знания в области базовых понятий квантовой химии и строения молекул.	удовлетворительно	сформирован
Студент не показал знаний, необходимых для решения поставленной задачи. Расчеты выполнены со значительными погрешностями, а выводы не соответствуют полученным результатам. При ответах на дополнительные вопросы студент испытывает значительные затруднения и неспособен сформулировать четких однозначных ответов.	неудовлетворительно	не сформирован

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

- при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

- при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

- при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:
- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа. Для лиц с нарушениями слуха:
- в печатной форме,
- в форме электронного документа.
Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
- в печатной форме,
- в форме электронного документа.
Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

5 Перечень учебной литературы, информационных ресурсов и технологий

5.1 Учебная литература

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.) - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5- 00101- 502-4. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104#book_name

2. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 2-е изд., испр. и доп. - Санкт- Петербург : Лань, 2022. - 236 с. - https://e.lanbook.com/book/90007#authors.

3. Сизова, О.В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Сизова, Н.В. Иванова, А.А. Ванин. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2021. - 276 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2173-2. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/76285#book_name

4. Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с. - (Учебники и учебные пособия). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5222001067

5.2 Периодические издания:

1. Журнал общей химии
2. Журнал неорганической химии
3. Журнал физической химии

5.3. Интернет-ресурсы, в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «ЮРАЙТ» https://urait.ru/
2. ЭБС «УНИВЕРСИТЕТСКАЯ БИБЛИОТЕКА ОНЛАЙН» www.biblioclub.ru
3. ЭБС «BOOK.ru» https://www.book.ru

4. ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com
5. ЭБС «ЛАНЬ» https://e.lanbook.com

Профессиональные базы данных:

1. Национальная электронная библиотека (доступ к Электронной библиотеке диссертаций Российской государственной библиотеки (РГБ) https://rusneb.ru/
2. Научная электронная библиотека (НЭБ) http://www.elibrary.ru/

Ресурсы свободного доступа:

1. КиберЛенинка (http://cyberleninka.ru/);
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" http://window.edu.ru/;
3. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов http://school-collection.edu.ru/

Собственные электронные образовательные и информационные ресурсы КубГУ:

1. Среда модульного динамического обучения http://moodle.kubsu.ru
2. База учебных планов, учебно-методических комплексов,публикаций и конференций http://mschool.kubsu.ru/
3. Библиотека информационных ресурсов кафедры информационных образовательных технологий http://mschool.kubsu.ru;
4. Электронный архив документов КубГУ http://docspace.kubsu.ru/

6 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

По курсу «Строение вещества» предусмотрено проведение аудиторных занятий в форме лекций и практических занятий. Лекция предполагает передачу в структурированной форме систематизированной информации большого объёма. Посещение и конспектирование лекции студентами способствует формированию общих подходов и принципов усвоения содержания данной дисциплины, содействует активизации мышления, нацеливает на дальнейшую самостоятельную познавательную деятельность. Рекомендуется конспектировать лекции по принципу выделения опорных пунктов той или иной темы, что позволит в дальнейшем углублять полученные на лекциях знания при помощи дополнительных источников информации. Разделы лекций, которые вызывают затруднения, могут быть обсуждены в форме вопросов, заданных после лекции, или в ходе консультаций.

Практические занятия, в ходе которых проводится краткий опрос студентов и обсуждение вопросов изучаемой темы, способствуют лучшему усвоению теоретическогоматериала. При подготовке к практическим занятиям рекомендуется на первом этапе тщательно проработать конспекты лекций. В случае возникновения вопросов по теоретическим проблемам математических основ квантовомеханического описания теории строения вещества рекомендуется повторить соответствующие разделы курса высшей математики и физики.

Важнейшим этапом освоения дисциплины является самостоятельная работа. В процессе подготовки рефератов студенты сочетают самостоятельную индивидуальную и групповую работу, что является важнейшим этапом освоения дисциплины. При подготовке рефератов рекомендуется составить подробный план, который предусматривает изучение как основной учебной, так и дополнительной научной литературы. В ходе подготовки следует использовать как традиционные источники информации, так и электронные библиотечные системы. Иллюстративный материал готовится в виде презентации, которая должна отражать основное содержание каждого раздела реферата. Список использованных литературных источников составляется в соответствии с существующими нормами библиографического описания.

№	Наименование раздела	Формы самостоятельной работы	Формы отчетности
1	Квантово-механическая теория строения вещества	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	У
2	Симметрия молекул	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	У
3	Энергетические аспекты строения молекул. Электрические и магнитные свойства веществ	Самостоятельное изучение разделов. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet. Подготовка реферата с использованием учебной и современной научной литературы.	Р
4	Строение вещества в конденсированном состоянии	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	У

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

7 Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

Наименование специальных помещений	Оснащенность специальных помещений	Перечень лицензионного программного обеспечения
Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: экран, проектор, компьютер	Microsoft Windows; Microsoft Office
Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: экран, проектор, компьютер	Microsoft Windows; Microsoft Office
Учебные аудитории для курсового проектирования (выполнения курсовых работ)	Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.	

Для самостоятельной работы обучающихся предусмотрены помещения, укомплектованные специализированной мебелью, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

Наименование помещений для самостоятельной работы обучающихся	Оснащенность помещений для самостоятельной работы обучающихся	Перечень лицензионного программного обеспечения
Помещение для самостоятельной работы обучающихся (читальный зал Научной библиотеки)	Мебель: учебная мебель. Комплект специализированной мебели: компьютерные столы. Оборудование: компьютерная техника с подключением к информационно-коммуникационной сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду образовательной организации, веб-камеры, коммуникационное оборудование, обеспечивающее доступ к сети интернет (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi).	Microsoft Windows; Microsoft Office

Помещение для самостоятельной работы обучающихся (ауд. 411С)	Мебель: учебная мебель. Комплект специализированной мебели: компьютерные столы. Оборудование: компьютерная техника с подключением к информационно-коммуникационной сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду образовательной организации, веб-камеры, коммуникационное оборудование, обеспечивающее доступ к сети интернет (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi).	Microsoft Windows; Microsoft Office