

СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО  
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет  
Кафедра

*Естественнонаучный*  
*Химии и химической технологии*

**Аннотация рабочей программы дисциплины (модуля)**

дисциплина

*Строение молекулы*

***Блок Б1, вариативная часть, Б1.В.ДВ.04.02***

цикл дисциплины и его часть (базовая, вариативная, дисциплина по выбору)

Направление

***18.03.01***

код

***Химическая технология***

наименование направления

Программа

***Технология и переработка полимеров***

Форма обучения

***Заочная***

Для поступивших на обучение в  
***2020 г.***

Стерлитамак 2022

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

### 1.1. Перечень планируемых результатов освоения образовательной программы

Выпускник, освоивший программу высшего образования, в рамках изучаемой дисциплины, должен обладать компетенциями, соответствующими видам профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа:

Готовностью использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3)

Готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-18)

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

Формируемая компетенция (с указанием кода)	Этапы формирования компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
Готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-18)	1 этап: Знания	Обучающийся должен знать: основные понятия, постулаты, модели, номенклатуру, используемые при квантовохимическом описании атомных и молекулярных систем и химических реакций
	2 этап: Умения	Обучающийся должен уметь: осуществлять решения простейших задач о движении частицы
	3 этап: Владения (навыки / опыт деятельности)	Обучающийся должен владеть: навыками применения структурных особенностей органических и неорганических веществ для предсказания их реакционной способности и химических реакций
Готовностью использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3)	1 этап: Знания	Обучающийся должен знать: фундаментальные понятия и модели современной теории строения вещества при физико-химическом исследовании химических веществ на разных уровнях организации их структуры.
	2 этап: Умения	Обучающийся должен уметь: решать многочисленные задачи в рамках приближения Хюккеля, не требующего громоздких расчетов с применением вычислительной техники, быстро определять тип термов сложных молекул, симметрию колебательных и вращательных состояний и

		разрешенные переходы.
	3 этап: Владения (навыки / опыт деятельности)	Обучающийся должен владеть: использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания о строении вещества.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Курс “Строение молекулы” для студентов предусматривает углубленное изучение теории химической связи и реакционной способности веществ. Данный курс последовательно развивает первоначальные сведения о теории строения вещества, полученные студентами при изучении дисциплины "Общая и неорганическая химия".

Дисциплина изучается на 2 курсе в 3, 4 семестрах

## 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 72 акад. ч.

Объем дисциплины	Всего часов
	Заочная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины	72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	6
практических (семинарских)	8
другие формы контактной работы (ФКР)	0,2
Учебных часов на контроль (включая часы подготовки):	3,8
зачет	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	54

Формы контроля	Семестры
зачет	4

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

### 4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Наименование раздела / темы дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)	
		Контактная работа с преподавателем	СР

		<b>Лек</b>	<b>Пр/Сем</b>	<b>Лаб</b>	
<b>3</b>	<b>Реакционная способность молекул</b>	<b>2,5</b>	<b>1</b>	<b>0</b>	<b>18</b>
2.3	Молекулы: электронная оболочка и ядерный остов	0,5	1,5	0	6
2.2	Одно- и многоэлектронные атомы	0,5	1	0	6
3.1	Химическая реакционная способность молекул	1	0	0	6
2.1	Субатомные структуры	1	0	0	6
<b>2</b>	<b>Квантовомеханическая модель молекулы</b>	<b>2</b>	<b>2,5</b>	<b>0</b>	<b>18</b>
1.3	Физические структурные модели	0,5	1	0	6
1.2	Математические структурные модели	0,5	0,5	0	6
1.1	Основные понятия теории структур	0,5	1	0	6
<b>1</b>	<b>Виды структурных моделей</b>	<b>1,5</b>	<b>2,5</b>	<b>0</b>	<b>18</b>
3.2	Молекулы во внешних полях	0,5	1	0	6
3.3	Межмолекулярные взаимодействия и макроструктуры	1	0	0	6
	<b>Итого</b>	<b>6</b>	<b>6</b>	<b>0</b>	<b>54</b>

#### 4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)

Курс лекционных занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
<b>3</b>	<b>Реакционная способность молекул</b>	
2.3	Молекулы: электронная оболочка и ядерный остов	<p>Электронная оболочка молекул. Квантово-механическая модель молекулы и ее отношение к классической структурной модели. Типы механических движений в молекулах, разделение ядерных и электронных движений, приближение Борна – Оппенгеймера. Ядерная и электронная составляющие волновой функции молекулы. Понятие о поверхности потенциальной энергии молекулы. Электронная волновая функция, ее построение из одноэлектронных функций, методы ВС и МО. Выбор базисного набора и проблема его оптимизации. Вариант МО ЛКАО. Понятие о неэмпирических и полуэмпирических вариантах метода МО. Метод МО Хюккеля.</p> <p>Орбитальная модель молекулы. Типы молекулярных орбиталей (канонические, локализованные, многоцентровые), их классификация по симметрии, узловой структуре, относительной энергии, заселенности. Электронная конфигурация молекулы. Орбитальные энергии (остовный и резонансный интегралы) и полная энергия молекулы (кулоновские и обменные интегралы), понятие о конфигурационном взаимодействии. Расчет</p>

		<p>молекулярных характеристик в методе МО: электронная плотность и заряд атома, порядки связей, поляризуемости, индексы свободной валентности. Ядерный остов молекул. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Топология молекулы, топологические графы и матрицы. Пространственная конфигурация (форма) молекулы и ее определение, метод ОЭПВО. Структурно-нежесткие молекулы. Флуктуации структуры и их типы: таутомерные переходы, инверсии (пирамидальные, циклические, плоские), псевдовращения, конформационные повороты. ППЭ и химические формы. Спиновые состояния ядерного остова молекулы. Построение и оптимизация спиновых волновых функций молекулы, понятие о спин-гамильтониане. Принципы ЯМР- спектроскопии. Колебания и вращения молекул. Колебательные и вращательные стационарные состояния, их энергии и квантовые числа. Модель нормальных колебаний. Взаимодействие с окружающей средой, колебательные и вращательные суммы по состояниям.</p>
2.2	Одно- и многоэлектронные атомы	<p>Одноэлектронный атом. Стационарные состояния атома водорода. Волновые функции, их типы, узловая структура и симметрия, комплексное и действительное представление, радиальная и угловая части. Электронное облако, его форма и плотность. Наблюдаемые атома: энергия, орбитальный и спиновой моменты и их проекции, полный механический момент и его проекции, их допустимые значения. Квантовые числа (главное, орбитальное, спиновое, магнитное орбитальное и магнитное спиновое, квантовые числа полного механического момента). Многоэлектронные атомы (МЭА). Состав и типы взаимодействий в МЭА. Одноэлектронное приближение и орбитальная модель. Принцип Паули, электронная конфигурация. Построение глобальной волновой функции из атомных спин-орбиталей в виде определителя Слэтера. Понятие о методах оптимизации АО: метод самосогласованного поля, эффективный потенциал и Хартри-фоковские АО, приближение центрального поля, модель Слэтера – Зенера. Глобальные характеристики МЭА. Орбитальные энергии и полная электронная энергия, кулоновские и обменные интегралы. Механические моменты: орбитальный, спиновой и полный, их квантовые числа, спин-орбитальное взаимодействие, LS- и jj-модели. Атомные термы, их обозначения. Расщепление термов за счет межэлектронных и спин-орбитальных взаимодействий, влияние слабого и сильного внешнего магнитного поля.</p>
3.1	Химическая реакция способность молекул	<p>Химические реакции. Механическая модель элементарного химического акта (ЭА): траектория ЭА, энергетический профиль, потенциальный барьер, энергетический эффект и энергия активации. Вероятность ЭА и скорость химической реакции. Реакционная способность молекул, индексы реакционной способности. Адиабатические и</p>

		неадиабатические реакции. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Методы Вудворда – Хоффмана, Фукуи, Дьюара – Циммермана.
2.1	Субатомные структуры	Характеристики и классификация элементарных частиц: лептоны и кварки, цветовые взаимодействия, барионы и мезоны. Взаимные превращения элементарных частиц, законы сохранения. Античастицы. Атомные ядра. Характеристики ядер (нуклонный состав, зарядовое и массовое число, спин и магнитный момент, квадрупольный момент). Изотопы и изобары. Ядерные силы, их особенности, проблема стабильности ядер. Понятие об оболочечной модели ядра, энергетические уровни. Ядерная спектроскопия (ЯГР, ЯМР, ЯКР) и ее применение в химии. Ядерные реакции ( $\alpha$ -распад, электронный и позитронный - распады, К-захват, деление, синтез). Законы сохранения в ядерных реакциях.
<b>2</b>	<b>Квантовомеханическая модель молекулы</b>	
1.3	Физические структурные модели	Свободная частица, частица в одномерном и трехмерном потенциальном ящике, плоский ротатор, одномерный гармонический осциллятор, многомерный осциллятор и метод нормальных колебаний, системы с двумя состояниями (на примере молекулярного иона водорода) и квантовомеханический резонанс. Волновые функции стационарных состояний и допустимые значения наблюдаемых для каждой модели. Статистические системы и их классификация: закрытые (отсутствие контактов с термостатом и резервуарами частиц), термостатированные (термический контакт с термостатом), открытые (диффузионный контакт с резервуаром частиц). Статистический ансамбль, его разновидности (микрочанонический, канонический, большой канонический), статистические суммы, температура и химический потенциал
1.2	Математические структурные модели	Точечные группы симметрии (ТГС) молекул: элементы и операции симметрии, групповая операция (композиция), таблица умножения группы, классификация ТГС. Классы эквивалентности и типы симметрии (неприводимые представления), их номенклатура, таблицы характеров. Физико-химические приложения ТГС: классификация и построение молекулярных орбиталей и нормальных колебаний, правила отбора и др.
1.1	Основные понятия теории структур	Теоретические способы описания свойств и строения веществ. Континуально-эмпирические и корпускулярно-структурные теории. Структурный подход (структурализм) и структурные задачи. Основные понятия теории структур: частицы, взаимодействия, структуры, упорядоченность. Структурные уровни, их иерархия. Общие (инвариантные) свойства структур. Математический и физико-химический структурализм. Моделирование как метод науки о строении вещества. Физико-химические и математические модели. Ограниченность и другие особенности структурных моделей.

<b>1</b>	<b>Виды структурных моделей</b>	
3.2	Молекулы во внешних полях	Постоянное электрическое поле: индукционная и ориентационная поляризуемость молекул. Постоянное магнитное поле: магнитная восприимчивость, диа- и парамагнетизм молекул. Переменные поля: резонансные взаимодействия, молекулярная спектроскопия, ее типы и химические приложения, нерезонансные взаимодействия (рассеяние, преломление, вращение плоскости поляризации и другие эффекты). Применение в элементном и структурном химическом анализе.
3.3	Межмолекулярные взаимодействия и макроструктуры	Межмолекулярные взаимодействия, их типы и особенности. Структурирование макросистем. Равновесные структуры. Кристаллические и аморфные структуры, промежуточные типы. Описание геометрических и электронно-энергетических характеристик. Поверхность, особенности ее строения и свойств. Дефекты, их типы. Релаксационные процессы в макросистемах. Микроскопический механизм и направление релаксации. Релаксационные уравнения. Время релаксации и релаксационный спектр. Диссипативные структуры (ДС). Условия образования. Типы ДС: пространственные, временные, волновые. Устойчивость ДС, принцип Пригожина. Детерминированные и случайные характеристики ДС. Квантовые эффекты в макросистемах: сверхтекучесть, сверхпроводимость, ферромагнетизм.

#### Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
<b>3</b>	<b>Реакционная способность молекул</b>	
2.3	Молекулы: электронная оболочка и ядерный остов	<p>Методы построения электронной волновой функции молекулы: ВС и МО. Описание молекулы водорода методом ВС: резонансные формы и их волновые функции. Оптимизация коэффициентов суперпозиции: учет пространственной и перестановочной симметрии. Стационарные состояния. Вычисление полной энергии молекулы, энергетическая диаграмма. Атомные, кулоновские и обменные интегралы. Использование урезанных базисов, теория резонанса и ее использование в химии.</p> <p>Описание молекулы водорода методом МО: молекулярные спин-орбитали и электронные конфигурации молекулы. Глобальные волновые функции стационарных состояний с учетом пространственной симметрии. Вычисление полной энергии молекулы и орбитальных энергий. Орбитальные, кулоновские и обменные интегралы. Глобальная энергетическая диаграмма. Одноэлектронные интегралы — остовный и резонансный, корреляционная диаграмма. Учет конфигурационного взаимодействия. Сравнение методов ВС и МО. Метод МО Хюккеля: принятые приближения. Нахождение коэффициентов хюккелевских МО и их</p>

		энергий для линейных полиенов и аннуленов. Анализ эффектов сопряжения и ароматичности. Вычисление молекулярных характеристик: заряды атомов, порядки связей, индексы свободной валентности, поляризуемости).
2.2	Одно- и многоэлектронные атомы	Одноэлектронный атом. Стационарные состояния атома водорода. Волновые функции, их типы, узловая структура и 9 симметрия, комплексное и действительное представление, радиальная и угловая части. Электронное облако, его форма и плотность. Наблюдаемые атома: энергия, орбитальный и спиновой моменты и их проекции, полный механический момент и его проекции, их допустимые значения. Квантовые числа (главное, орбитальное, спиновое, магнитное орбитальное и магнитное спиновое, квантовые числа полного механического момента). Многоэлектронные атомы (МЭА). Атомные термы, их обозначения. Правила Хунда. Расщепление термов за счет межэлектронных и спин-орбитальных взаимодействий, влияние слабого и сильного внешнего магнитного поля.
<b>2</b>	<b>Квантовомеханическая модель молекулы</b>	
1.3	Физические структурные модели	Свободная частица, частица в одномерном и трехмерном потенциальном ящике, плоский ротатор, одномерный гармонический осциллятор, многомерный осциллятор и метод нормальных колебаний, системы с двумя состояниями (на примере молекулярного иона водорода) и квантовомеханический резонанс. Волновые функции стационарных состояний и допустимые значения наблюдаемых для каждой модели. Статистический ансамбль: статистические суммы, температура и химический потенциал.
1.2	Математические структурные модели	Математические структуры: элементы и алгебраические операции. Точечные группы симметрии (ТГС) молекул: элементы и операции симметрии, групповая операция (композиция), таблица умножения группы, классификация ТГС. Классы эквивалентности и типы симметрии (неприводимые представления), их номенклатура, таблицы характеров. Физико-химические приложения ТГС: классификация и построение молекулярных орбиталей и нормальных колебаний, правила отбора и др.
1.1	Основные понятия теории структур	Структурные задачи и их типы. Основные понятия теории структур: частицы, взаимодействия, структуры, упорядоченность. Структурные уровни, их иерархия. Математический и физико-химический структурализм. Физико-химические и математические структурные модели. Ограниченность и другие особенности структурных моделей.
<b>1</b>	<b>Виды структурных моделей</b>	
3.2	Молекулы во внешних полях	Постоянное электрическое поле: индукционная и ориентационная поляризуемость молекул. Постоянное магнитное поле: магнитная восприимчивость, диа- и парамагнетизм молекул. Переменные поля: резонансные взаимодействия, молекулярная спектроскопия, ее типы и химические приложения, нерезонансные взаимодействия

		<p>(рассеяние, преломление, вращение плоскости поляризации и другие эффекты). Применение в элементном и структурном химическом анализе. Колебания ядерного остова. Модель гармонического осциллятора. Колебания многоатомных молекул, модель нормальных колебаний, формы нормальных колебаний и их симметрия. Возбуждение колебательных переходов и колебательная спектроскопия. Вращения молекул. Модель плоского ротатора. Момент инерции и вращательная постоянная. Понятие о моделях волчков. Возбуждение вращательных переходов и вращательная спектроскопия.</p>
--	--	--