

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Строение молекул и основы квантовой химии БЗ.ДВ.5

Направление подготовки: 050100.62 - Педагогическое образование

Профиль подготовки: Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Низамов И.С.

Рецензент(ы):

Низамов И.Д.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Гильманшина С. И.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань

2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Низамов И.С. Кафедра химического образования Химический институт им. А.М. Бутлерова, Ilyas.Nizamov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Строение молекул и основы квантовой химии" являются:

1. сформировать у студентов теоретический фундамент для изучения предметов химического цикла;
2. способствовать приобретению студентами знаний по основным вопросам строения вещества, химической связи, межмолекулярных взаимодействий, понятий теории строения молекул, геометрических характеристик многоатомных молекул.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.ДВ.5 Профессиональный" основной образовательной программы 050100.62 Педагогическое образование и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Дисциплина "Строение молекул и основы квантовой химии" относится к разделу Б.3. профессионального цикла, дисциплины по выбору ДВ5.

Дисциплина способствует приобретению студентами фундаментальных знаний по современной теории химического строения, раскрывает методологию определения сим-метрии молекулярных систем, вырабатывает у студентов умения и навыки определения видов химической связи.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
СК-2	Имеет представление о строении молекул и основах квантовой химии.

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные положения квантовой механики, основы современной теории химического строения молекул, виды химической связи, строение многоатомных молекул;

2. должен уметь:

строить энергетические диаграммы МО ЛКАО и модели электронного строения атомов и молекул, решать модельные задачи квантовой химии;

3. должен владеть:

навыками по определению гибридизации орбиталей химических веществ.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

к обучению учащихся школ к освоению строения вещества.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основы современной теории химического строения.	3	1	2	0	2	тестирование
2.	Тема 2. Основные положения квантовой механики.	3	2	2	0	2	устный опрос
3.	Тема 3. Симметрия атомных орбиталей.	3	3	2	0	2	тестирование
4.	Тема 4. Химическая связь и строение молекул.	3	4	2	0	2	контрольная работа
5.	Тема 5. Симметрия молекулярных систем.	3	5	2	0	2	тестирование
6.	Тема 6. Виды химической связи.	3	6	2	0	2	устный опрос
7.	Тема 7. Строение многоатомных молекул.	3	7	2	0	2	контрольная работа
8.	Тема 8. Гибридизация орбиталей и химическая связь	3	8	2	0	2	устный опрос
9.	Тема 9. Межмолекулярные взаимодействия и строение фаз.	3	9	2	0	2	тестирование
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	экзамен
	Итого			18	0	18	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основы современной теории химического строения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Модели атома. Планетарная модель атома. Атомные спектры. Квантовая теория света. Строение электронной оболочки по Бору. Предположения де Бройля.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Квантовые числа.

Тема 2. Основные положения квантовой механики.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Понятие о квантовой механике. Принцип неопределенности Гейзенберга. Волновое уравнение Шрёдингера. Гамильтониан. Понятие орбитали. Квантовые состояния атомов и молекул. Квантово-механическая модель атома. Главное квантовое число. Орбитальное квантовое число. Магнитное квантовое число. Спиновое квантовое число.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Симметрия атомных орбиталей.

Тема 3. Симметрия атомных орбиталей.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Распределение электронов в многоэлектронных атомах. Принцип минимума энергии. Правило Клечковского. Принцип Паули. Правило Гунда.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Метод молекулярных орбиталей. Виды МО.

Тема 4. Химическая связь и строение молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Молекулы. Теория химического строения. Образование химической связи. Метод валентных связей. Основные положения метода валентных связей. Валентные схемы. Ковалентность. Спинвалентность.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Классификация молекулярных орбиталей по симметрии.

Тема 5. Симметрия молекулярных систем.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Метод молекулярных орбиталей. Приближение МО ЛКАО. Виды молекулярных орбиталей. Число химических связей. ВЗМО. НВМО. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Электроотрицательность.

Тема 6. Виды химической связи.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Внутри- и межмолекулярная, ковалентная, ионная, металлическая, локализованная, делокализованная связь. Электроотрицательность. Ионность связи. Ковалентная связь. Валентность. Ковалентность атомов. Электровалентность. Порядок связи.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Строение трехатомных молекул.

Тема 7. Строение многоатомных молекул.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Строение двухатомных молекул. Диамагнетики. Парамагнетики. Радикалы. Строение трехатомных молекул. Молекулярная структура многоатомных молекул.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Гибридизация.

Тема 8. Гибридизация орбиталей и химическая связь

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Гибридизация. Ионная связь. Полярность ионов. Делокализованная ковалентная связь. Металлическая связь.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Делокализованная ковалентная связь.

Тема 9. Межмолекулярные взаимодействия и строение фаз.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Межмолекулярные взаимодействия. Водородное взаимодействие. Строение конденсированных фаз.

лабораторная работа (2 часа(ов)):

Водородное взаимодействие.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Основы современной теории химического строения.	3	1	подготовка к тестированию	5	тестирование
2.	Тема 2. Основные положения квантовой механики.	3	2	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
3.	Тема 3. Симметрия атомных орбиталей.	3	3	подготовка к тестированию	5	тестирование
4.	Тема 4. Химическая связь и строение молекул.	3	4	подготовка к контрольной работе	5	контрольная работа
5.	Тема 5. Симметрия молекулярных систем.	3	5	подготовка к тестированию	5	тестирование
6.	Тема 6. Виды химической связи.	3	6	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
7.	Тема 7. Строение многоатомных молекул.	3	7	подготовка к контрольной работе	5	контрольная работа
8.	Тема 8. Гибридизация орбиталей и химическая связь	3	8	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
9.	Тема 9. Межмолекулярные взаимодействия и строение фаз.	3	9	подготовка к тестированию	5	тестирование
	Итого				45	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

В процессе преподавания будут использоваться компьютерные (реализуются в рамках системы "учитель-компьютер-ученик" с помощью обучающих программ различного вида (информационных, тренинговых, контролирующих, развивающих и др.), диалоговые (связаны с созданием коммуникативной среды, расширением пространства сотрудничества на уровне "учитель-ученик", "ученик-ученик", "учитель-автор", "ученик-автор" в ходе постановки и решения учебно-познавательных задач), тренинговые (система деятельности по отработке определенных алгоритмов учебно-познавательных действий и способов решения типовых задач в ходе обучения (тесты и практические упражнения) технологии.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Основы современной теории химического строения.

тестирование , примерные вопросы:

1. Химический элемент ? совокупность атомов с: А) одинаковым числом нейтронов; Б) одинаковым числом электронов; В) одинаковой массой; Г) одинаковым зарядом ядра. 2. Изотопы ? атомы одного и того же химического элемента с различным: А) числом позитронов; Б) числом электронов; В) числом протонов; Г) массовыми числами. 3. Максимальное число электронов, которое может находиться на электронном слое равно: А) $2n^2$; Б) $n + 1$; В) 0, 1, 2, ?; (n ? l); Г) $+ 1/2$. 4. Бертоллиды ? химические соединения: А) являющиеся жидкостями; Б) имеющие стехиометрический состав; В) являющиеся газами; Г) имеющие атомную структуру. 5. Альфа-частицы ? это: А) ядра атомов водорода; Б) ядра атомов гелия; В) поток электронов; Г) поток нейтронов. 6. Частота отдельных линий в линейчатых спектрах атомов описывается формулой: А) Бальмера; Б) Пашена; В) Ридберга; Г) Лаймана. 7. Планетерную модель атома создал: А) Бор; Б) Борн; В) Резерфорд; Г) Планк. 8. Выражение $E = h \cdot \nu$ является уравнением: А) Эйнштейна; Б) Планка; В) де Бройля; Г) Бора. 9. Область пространства, где наиболее вероятно нахождение электрона: А) соответствует размеру молекулы; Б) определяется уравнением Планка; В) называется орбиталью; Г) описывается акустической функцией. 10. Система микрочастиц является стационарной, если система: А) обладает постоянной энергией; Б) не испускает и не поглощает квант света; В) имеет постоянный состав; Г) не изменяется во времени.

Тема 2. Основные положения квантовой механики.

устный опрос , примерные вопросы:

Основные положения квантовой механики. Квантовые числа.

Тема 3. Симметрия атомных орбиталей.

тестирование , примерные вопросы:

21. Минимальной энергией обладает: А) связывающая молекулярная орбиталь; Б) несвязывающая молекулярная орбиталь; В) разрыхляющая молекулярная орбиталь; Г) вырожденная молекулярная орбиталь. 22. Вырожденными являются молекулярные орбитали: А) с максимальной энергией; Б) с минимальной энергией; В) с одинаковой энергией; Г) которые не учитываются при квантовохимических расчетах. 23. Число химических связей в молекуле равно: А) числу высших занятых молекулярных орбиталей; Б) числу низших вакантных молекулярных орбиталей; В) числу связывающих молекулярных орбиталей минус число несвязывающих молекулярных орбиталей; Г) числу пар связывающих электронов минус число пар разрыхляющих электронов. 24. Сродство к электрону: А) определяется энергией высшей занятой орбитали; Б) определяется способностью отдавать электрон на орбиталь; В) является количественной характеристикой электроноакцепторных свойств молекулы; Г) численно равно дипольному моменту. 25. Выражение $\text{ПМО} = -\text{ЕМО}$ соответствует: А) уравнению Шредингера; Б) теореме Купманса; В) представлениям Гунда и Малликена; Г) представлениям Гейтлера и Лондона.

Тема 4. Химическая связь и строение молекул.

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Квантовая теория света. 2. Образование химической связи. 3. Гибридизация.

Тема 5. Симметрия молекулярных систем.

тестирование , примерные вопросы:

26. Внутримолекулярная химическая связь налаживается: А) при образовании общей молекулярной орбитали; Б) в результате коллективного движения электронов; В) между молекулами в твердой фазе; Г) между молекулами в жидкой фазе. 27. Понятие электроотрицательности ввел: А) Малликен; Б) Полинг; В) Купманс; Г) Гейтлер. 28. Электроотрицательность ? это: А) способность атома отдавать электрон другому атому; Б) способность атома присоединять электрон от другого атома; В) способность атома в молекуле притягивать к себе электроны; Г) способность электрона в атоме переходить с одного энергетического уровня на другой уровень. 29. Электроотрицательность: А) растет справа налево в периоде; Б) растет слева направо в периоде; В) увеличивается сверху вниз в подгруппе; Г) имеет наибольшее значение у типичных металлов. 30. Ионность связи: А) оценивают величинами зарядов ядер атомов; Б) введена для оценки электроотрицательности; В) равна разности между энергиями низшей вакантной молекулярной орбитали и высшей занятой молекулярной орбитали; Г) равна разности между электроотрицательностями атомов, образующих химическую связь. 31. Валентность: А) определяется эффективным зарядом ядра; Б) определяют по порядку связи; В) определяется различиями в электроотрицательностях атомов; Г) равна сумме ковалентности и модуля электровалентности. 32. Порядок связи: А) равен разности между числом электронов на связывающей молекулярной орбитали и числом электронов на разрыхляющей молекулярной орбитали, деленное на 2; Б) равен числу ковалентных связей; В) равен числу фронтальных орбиталей, деленное на 2; Г) равен разности между электроотрицательностями атомов, образующих ковалентную связь.

Тема 6. Виды химической связи.

устный опрос , примерные вопросы:

Виды молекулярных орбиталей. Металлическая связь. Основные положения метода валентных связей.

Тема 7. Строение многоатомных молекул.

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Молекулярная структура многоатомных молекул. 2. Водородное взаимодействие.

Тема 8. Гибридизация орбиталей и химическая связь

устный опрос , примерные вопросы:

Радикалы. Основные положения метода валентных связей.

Тема 9. Межмолекулярные взаимодействия и строение фаз.

тестирование , примерные вопросы:

41. В молекуле бутадиена атомы углерода: А) находятся в sp -гибридизации; Б) находятся в sp^2 -гибридизации; В) находятся в sp^3 -гибридизации; Г) не гибридизованы. 42. Металлическая связь: А) насыщена; Б) ненасыщена; В) направлена; Г) является локализованной. 43.

Межмолекулярные взаимодействия образуются между молекулами в: А) газовой фазе; Б) жидкой фазе; В) ионизированном газе; Г) плазме. 44. Водородная связь между молекулами воды образуется за счет: А) перекрывания атомных орбиталей атомов водорода и кислорода; Б) электростатического взаимодействия; В) образования общей молекулярной орбитали; Г) донирования неподеленной электронной пары атома кислорода.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Билет 1.

1. Основные понятия химии. Атом. Нуклоны. Химический элемент. Изотопы.
2. Правила распределение электронов в многоэлектронных атомах. Принцип минимума энергии. Правило Клечковского. Принцип Паули. Правило Гунда.

Билет 2.

1. Спиновое квантовое число.
2. Основные положения метода валентных связей.

Билет 3.

1. Метод молекулярных орбиталей.

2. Главное квантовое число. Орбитальное квантовое число. Магнитное квантовое число.

Билет 4.

1. Водородная связь.
2. Виды молекулярных орбиталей.

Билет 5.

1. Валентные схемы. Ковалентность. Спинвалентность.
2. Виды молекулярных орбиталей.

Билет 6.

1. Межмолекулярные взаимодействия.
2. Делокализованная ковалентная связь.

Билет 7.

1. Ионная связь.
2. Классификация молекулярных орбиталей по энергии (ВЗМО и НВМО) и симметрии. Теорема Купманса.

Билет 8.

1. Виды химической связи.
2. Электроотрицательность.

Билет 9.

1. Строение двухатомных молекул.
2. Принцип неопределенности Гейзенберга.

Билет 10.

1. Металлическая связь.
2. Молекулярная структура многоатомных молекул.

7.1. Основная литература:

1. Чмутова Г.А. Аспекты связи "Строение - реакционная способность": учебное пособие - - Казань: КФУ, 2010. - 93 с. - 75 экз.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. - 2-е изд. (эл.). Бинوم. Лаборатория знаний, 2012. - 496 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150
3. Крашенинин, В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. - Кемерово: Изд-во КемГУ, 2012. - 56 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=44352
4. Гуров А.А. Строение вещества: метод. указания к выполнению лабораторной работы по курсу "Общая химия"- М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. - 34 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=52561

7.2. Дополнительная литература:

1. Сироткин, Р.О. Химическая связь: учебное пособие по дисциплине "Химия" / Р.О.Сироткин, О.С. Сироткин. - Казань: Казанский гос. энергетический ун-тет, 2010. - 50 с. - 1 экз.
2. Цышевский, Р.В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций: учебно-методическое пособие / Цышевский Р.В., Гарифзянова Г.Г., Храпковский Г.М. - Казань: КНИТУ, 2012. - 85 с. - 1 экз.
3. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул / И. Майер. - 2-е изд. Бинوم. Лаборатория знаний, 2014. - 383 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50535

4. Строение вещества. Строение кристаллов / Под ред. К.Н. Мохова. - М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. - 35 с.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=52473

7.3. Интернет-ресурсы:

В.М.Ковба, В.И.Пупышев Двухатомные молекулы: спектры и -

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kovba-pupyshev/welcome.html>

Кафедра квантовой химии - http://quant.distant.ru/konspekt_atom.htm

Методы расчета молекул - http://quant.distant.ru/files/pdf/MOL_razd.pdf

Российский химико-технологический университет - <http://quant.distant.ru/files/pdf/chbond.pdf>

Синаноглу О. (ред.) Современная квантовая химия. Том 2 :: Электронная.. - lib.mexmat.ru

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Строение молекул и основы квантовой химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Имеется специализированная химическая лаборатория, лекционная аудитория. Лабораторное оборудование (электронные весы, термоблок, сушильный шкаф, аналитические весы) и химическая посуда. Ноутбук. Мультимедийный проектор. Библиотечный фонд.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 050100.62 "Педагогическое образование" и профилю подготовки Химия .

Автор(ы):

Низамов И.С. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Низамов И.Д. _____

"__" _____ 201__ г.