

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Кафедра физической и органической химии химического факультета

Образовательная программа

04.05.01 - «ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

Профиль подготовки

Неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия

Уровень высшего образования

Специалитет

Форма обучения

Очная

Статус дисциплины: базовая

Махачкала, 2017 г.

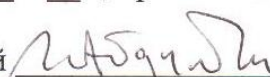
Рабочая программа дисциплины “**Строение вещества**” составлена в 2017 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности **04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»** (уровень специалитета).

от «12» сентября 2016г. № 1174.

Разработчик: кафедра физической и органической химии, Шабанов О.М., д.х.н., профессор

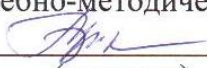
Рабочая программа дисциплины одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии
от «23» 03 2017г., протокол № 7

Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методического совета химического факультета
от «24» 03 2017г., протокол № 7.

Председатель  доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением « » _____ 20 г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Строение вещества” входит в базовую часть образовательной программы по специальности 04.05.01 - “Фундаментальная и прикладная химия”.

Дисциплина реализуется на факультете химическом кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением электронного строения атомов и молекул, симметрии молекул, физических методов – спектроскопических, дифракционных и резонансных - для установления структуры веществ в конденсированных состояниях.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: профессиональных ОПК-1,2,5.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, практические занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме коллоквиумов, контрольных работ и промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 3 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Семес тр	Учебные занятия						СРС, в том числе экзаме н	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференциро ванный зачет, экзамен
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
Лекц ии		Лаборатор ные занятия	Практич еские занятия	КСР	консул ьтации			
7 сем.	108	18	-	36	-	-	54	зачет

1. Цели освоения дисциплины

Преподавание строения вещества ставит цели:

- уметь определять геометрическую конфигурацию и симметрию с использованием положений теории групп;
- изучить поведение полярных и неполярных веществ в статическом и переменном электрических полях, методы определения дипольных моментов и связь дипольных моментов с геометрией и симметрией молекул;

- освоить теоретические основы спектроскопических методов, устанавливать связь между структурой, симметрией и активностью молекул в различных видах молекулярной спектроскопии, определить правила отбора переходов между вращательными, колебательными, колебательно-вращательными, электронными, электронно-колебательными и спиновыми состояниями;

- освоить классификацию межатомных и межмолекулярных взаимодействий, уметь строить потенциалы парных взаимодействий молекул и ионов в конденсированных фазах, овладеть методом функции радиального распределения, методикой определения структурных параметров жидкостей и кристаллов из рентгенографических и нейтронографических данных;

- изучить особенности строения и свойств мезофаз, поверхностных свойств конденсированных фаз.

2. Место дисциплины в структуре ООП специалитета

Дисциплина "Строение вещества" входит в базовую часть образовательной программы по специальности 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия.

Цели освоения дисциплины достигаются на основе фактического материала предшествующих курсов "Математика", "Физика", "Неорганическая химия", "Квантовая механика и квантовая химия", "Органическая химия", "Физическая химия", она служит основой при изучении курсов "Кристаллохимия" и "Физические методы исследования".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ОПК-1	Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Знать: основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач Уметь: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач Владеть: теоретическими основами традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-2	Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Знать: основные экспериментальные методы синтеза и исследования строения и анализа веществ и реакций Уметь: использовать современные методы синтеза, исследования и анализа химических веществ Владеть: владеть навыками

		химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
ОПК-5	Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений	Знать: необходимую для поиска и анализа научную информацию для синтеза, анализа и исследования веществ Уметь: использовать имеющийся научный багаж для обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений Владеть: навыками обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений с использованием современных научных методов.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 академических часов.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторная работа	Контроль самостоятельной работы		
Модуль 1. Строение и симметрия молекул									
1	Основы классической и квантовой теорий химического строения	7		2	2			8	устный опрос, тестирование
2	Геометрия и симметрия молекул. Точечные группы симметрии.	7		2	6			10	устный опрос, тестирование
<i>Итого по модулю 1:</i>			36	4	8			24	коллоквиум
Модуль 2. Электрические и спектроскопические свойства молекул									
1	Поляризация веществ. Поляризуемость и дипольмомент молекул	7		3	4			6	устный опрос, тестирование
2	Оптическая спектроскопия МК, ИК, КРС, ЭС	7		5	10			12	устный опрос, тестирование
<i>Итого по модулю 2:</i>			36	8	14			14	коллоквиум
Модуль 3. Структурная дифрактометрия. Строение конденсированных фаз									

1	Потенциалы парного взаимодействия.	7		2	4		4	устный опрос, тестирование
2	Структурная дифрактометрия	7		2	6		6	устный опрос, тестирование
3	Строение кристаллов, жидкостей и мезофаз. Поверхностные свойства конденсированн. фаз.	7		2	4		6	устный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 4:</i>		36	6	14		16	коллоквиум
	ИТОГО:		108	18	36		54	зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

Модуль 1. Строение и симметрия молекул

Тема 1. Основы классической и квантовой теорий химического строения

Лекция 1. Классическая теория химического строения. Типы изомерии
Квантовая теория химической связи. Методы МО и ВС.

Тема 2. Геометрия и симметрия молекул. Точечные группы симметрии.

Лекция 1. Геометрическая конфигурация молекул. Теория ОЭПВО Гиллеспи.
Геометрия и симметрия молекул. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления групп. Применение таблиц характеров НП для построения молекул, определения симметрий колебаний.

Модуль 2. Электрические и спектроскопические свойства молекул

Тема 1. Поляризация веществ. Поляризуемость и дипольмомент молекул

Лекция 1. Поляризация неполярных и полярных молекул в постоянном и переменном электрических полях. Дипольмомент и структура молекулы.

Тема 2. Оптическая спектроскопия МК, ИК, КРС, ЭС.

Лекция 1. Вращательные состояния. Жесткий ротатор в классической и квантовой теориях. Микроволновая спектроскопия. ИК - спектроскопия. Симметрия и активность колебаний. Колебательно-вращательные спектры. Колебательные и вращательные переходы при колебательном рассеянии излучения.

Лекция 2. Спектроскопия КРС. Электронные состояния. УФ-спектроскопия. Правила отбора переходов между вращательными, колебательными, колебательно-вращательными, электронными, электронно-колебательными и спиновыми состояниями. Применение теории групп симметрии. Обзор применения спектров для установления строения и симметрии молекул, идентификации веществ.

Модуль 3. Структурная дифрактометрия. Магниторезонансная спектроскопия. Строение конденсированных фаз

Тема 1. Потенциалы парного взаимодействия

Лекция 1. Потенциалы парного взаимодействия. Уравнения Ми, Морзе, Леннард-Донса.

Тема 2. Структурная дифрактометрия. Магниторезонансная спектроскопия

Лекция 1. Рентгенографическая и нейтронография конденсированных систем. Определение структурных параметров кристаллов и жидкостей.

Лекция 2. Магнитные свойства молекул. Магнитный резонанс.

Спектроскопия ЯМР. Химический сдвиг. Спектры ЯМР спин-спинового расщепления. Спектроскопия ЭПР. Сверхтонкая структура спектров. Структурные исследования методами ЯМР и ЭПР. Структурное исследование кристаллов и жидкостей.

Тема 3. Строение кристаллов, жидкостей и мезофаз. Поверхностные свойства конденсированных фаз.

Лекция 1. Строение кристаллов. Классификация. Симметрия. Модели строения жидкостей. Жидкие кристаллы: смектики, нематики, холестерики. Методы получения. Физико-химические свойства. Поверхностные свойства конденсированных фаз.

Темы практических и семинарских занятий

Целью семинарских занятий является:

- уметь определять геометрическую конфигурацию и симметрию молекул и комплексов;
- уметь методами МО и ВС получать систему МО и распределения на них электронов;
- знать поведение полярных и неполярных веществ в статическом и переменном электрических полях, методы определения дипольных моментов и связь дипольных моментов с геометрией и симметрией молекул;
- уметь из спектров определять спектроскопические константы и структурные параметры молекул, устанавливать связь между структурой, симметрией и активностью молекул и их колебаний в различных видах молекулярной спектроскопии;
- на основе теории групп определять правила отбора переходов между вращательными, колебательными, колебательно-вращательными, электронными, электронно-колебательными и спиновыми состояниями;
- изучение методов магнитного резонанса, уметь применять спектроскопию ЯМР и ЭПР в химии для установления и предсказания структуры, электронного строения и физико-химических свойств молекул;
- знать классификацию межатомных и межмолекулярных взаимодействий, уметь строить потенциалы парных взаимодействий молекул и ионов в конденсированных фазах;
- владеть методом функции радиального распределения, методикой определения структурных параметров жидкостей и кристаллов из рентгенографических и нейтронографических данных и результатов компьютерного моделирования структуры жидкостей;

- знать особенности строения и свойств мезофаз, поверхностных свойств конденсированных фаз.

Модуль 1. Строение и симметрия молекул

Тема 1. Основы классической и квантовой теорий химического строения

Семинарское занятие 1. Теория химического строения молекул. Изомерия, конформация, таутомерия. Квантовая теория химической связи. Квантовые состояния молекул. Распределение электронов на МО. Геометрическая конфигурация молекул

Литература: основн. [1,2,4,7,8], доп. [1,3,4-,7,11]

Вопросы к теме:

1. Изомерия валентная и структурная, конформация и таутомерия.
2. Орбитальная модель молекулы. Гибридизация АО. Классификация МО по энергии, симметрии и узловой структуре.
3. Геометрическая форма молекул и ее определение методом ОЭПВО.
4. Топология молекулы, цепь химического действия и топологические графы. Структурно-нежесткие молекулы.

Тема 2. Геометрия и симметрия молекул. Точечные группы симметрии.

Семинарское занятие 1. Геометрия молекул, теория ОВЭПВО Гиллеспи. Элементы и операции симметрии молекул. Точечные группы симметрии. Классы сопряженных операций. Представление групп. ПП и НП групп. Таблицы характеров НП конечных групп.

Литература: основн.[1,3,4,5,6,8], доп. [1,2,5,7,8]

Вопросы к теме:

1. Элементы и операции симметрии.
2. Умножение операций симметрии.
3. Прелбраования подобия и классы сопряженных элементов группы.
4. Составить приводимое представление метилениклопропена в базисе координат атомов углерода.

Модуль 2. Электрические и спектроскопические свойства молекул

Тема 1. Поляризация веществ. Поляризуемость и дипольмомент молекул

Семинарское занятие 1. Поляризация веществ в статических и переменных электрических полях. Уравнения Клаузиуса-Масотти, Лоренца-Лорентца и Дебая-Ланжевена. Методы определения дипольмомента. Связь дипольмомента со структурой и симметрией молекул. Векторная схема расчета дипольмоментов сложных молекул

Литература: основн. [1,3,4,8], доп. [4]

Вопросы к теме:

1. Указать, зависит ли от температуры поляризуемость молекулы.
2. Как изменятся и почему поляризация вещества?
3. Какая поляризация проявляется в видимой области излучения?
4. Какие методы определения дипольмомента вам известны?
5. Молекулы каких точечных групп симметрии полярны?

6. Молекулы каких точечных групп симметрии не полярны?

Тема 2. Оптическая спектроскопия МК, ИК, КРС, ЭС

Семинарское занятие 1. Вращательные и колебательные состояния. Правила отбора во вращательных, колебательных и колебательно-вращательных переходах. Электронные состояния. Литература: [3,4,8], доп. [4,9,10].

Семинарское занятие 2. Правила отбора электронных переходов по спину и переходов между АО и МО различной симметрии. Электронно-колебательные переходы, вибронные переходы. Анализ Деландра. Литература: [3,4,8], доп. [4,9,10].

Вопросы к теме:

1. Каково условие для матричного элемента дипольмомента ожидаемого перехода?
2. Что характерно для вращательного спектра жесткого ротатора?
3. Какова симметрия колебаний линейной и угловой молекулы AB_2 ?
4. Правила отбора переходов между вращательными, колебательными и колебательно-вращательными уровнями.
5. Правила отбора электронных переходов по спину и переходов между АО и МО различной симметрии. Электронно-колебательные переходы, вибронные переходы. Анализ Деландра.
6. Чем обусловлена окраска веществ?
4. Люминесценция, флуоресценция, фосфоресценция.

Модуль 3. Структурная дифрактометрия. Магниторезонансная спектроскопия. Строение конденсированных фаз

Тема 1. Потенциалы парного взаимодействия.

Семинарское занятие 1. Виды потенциалов парного взаимодействия. Их обобщение. Уравнения Ми, Морзе, потенциалы 9-6 и 12-6.

Семинарское занятие 2. Потенциалы парного взаимодействия, применяемые при моделировании конденсированных систем. Литература: основн.[8], доп. [12].

Вопросы к теме:

1. Потенциалы парного взаимодействия, применяемые при моделировании ионных пар, воды, водных растворов электролитов, ионных кристаллов, ионных жидкостей.
2. Какие виды парного взаимодействия характерны для раствора электролита?
3. Чем будут отличаться потенциалы парного взаимодействия при вычислении энергии ионного кристалла и ионной жидкости?
4. Какие виды взаимодействия обуславливают конденсированное состояние гелия водорода, диоксида углерода?

Тема 2. Структурная дифрактометрия. Магниторезонансная спектроскопия

Семинарское занятие 1. Электронографический метод исследования газообразных веществ.

Семинарское занятие 2. Рентгенографический и нейтронографический методы структурного изучения кристаллов и жидкостей.

Семинарское занятие 3. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса и электронного парамагнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие в ЯМР. Сверхтонкое расщепление спектров ЭПР. Их применение в структурном и магнетохимических исследованиях веществ
Литература: основн.[1,3,8], доп. [1,3,4-7].

Вопросы к теме:

1. Квантово-механическая интерпретация дифракции электронов и нейтронов.
2. Условия дифракции электронов. Нейтронов и рентгеновских лучей.
3. Чем отличаются рентгенографический и нейтронографический методы структурного исследования?
4. Указать тип квантовых переходов, лежащих в основе спектральных методов ЯМР и ЭПР.
5. Указать особенности строения молекулы, о которых можно получить информацию экспериментальными методами ЯМР- и – ЭПР спектроскопии.
6. Как проявляется и измеряется химический сдвиг?
7. Как будут выглядеть спектры ЯМР диметлового эфира и циклобутана?
8. Изобразите ожидаемый спектр спин-спинового взаимодействия этилацетата.

Тема 3. Строение кристаллов, жидкостей и мезофаз. Поверхностные свойства конденсированных фаз.

Семинарское занятие 1. Строение кристаллов и жидкостей. Изменение ФРР при плавлении. Изменение структурных параметров при плавлении льда и ионных кристаллов

Семинарское занятие 2. Строение мезофаз. Классификация жидких кристаллов. Поверхностные свойства конденсированных фаз.

Литература: основн.[4,8], доп. [4,12].

Вопросы к теме:

1. Типы ионных кристаллических решеток.
2. Изменение параметров решеток с изменением температуры.
3. Модели плавления ионных кристаллов, учет взаимодействия дефектов решетки.
4. Какие модели структуры жидкостей вам известны?
5. Комплексы и кластеры в жидкостях.
6. Какие виды жидких кристаллов вы знаете?
7. Какие методы получения ЖК вы знаете?
8. В чем проявляется и как используется анизотропия ЖК?
9. Чем отличается состояние атомов на поверхности и в объеме тела?
10. Какую роль играет поверхностное строение твердых тел на явление адсорбции?

5. Образовательные технологии

В ходе освоения дисциплины предусматривается применение следующих активных методов обучения:

- классические лекции с программируемым опросом, с использованием интерактивных средств - не менее 25%;
- обеспечение студентов конспектами лекций;
- семинарские занятия с анализом узловых теоретических положений, выделенных в лекциях;
- контрольные работы по каждому разделу теме курса;
- решение задач с использованием интерактивных и вычислительных средств, в том числе компьютерного моделирования структур сложных молекул приближенными методами квантовой химии и структуры жидкостей методом молекулярной динамики – не менее 10%;
- выполнение студентами индивидуальных многоэтапных и многовариантных задач, организация самостоятельного обучения;
- выполнение рефератов и докладов с их защитой;
- выполнение моделей молекул по методу стержень-шарик.
- итоговой контроль осуществляется посредством рейтинговой оценки

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

Для самостоятельной работы студенты обеспечены учебниками с грифом Минобрнауки, учебными пособиями и пособиями для самостоятельной работы студентами по разделам дисциплины, подготовленными в том числе на кафедре, и Интернет-ресурсом, справочниками. Студентам рекомендуются конспектирование первоисточников и другой учебной литературы, проработка учебного материала по учебной и научной и тем, не вошедших в лекционный материал, но обязательных согласно учебной программе дисциплины. По темам разделов студенты получают контрольные вопросы и задачи для решения, выполнение которых проверяется на семинарских занятиях. На них разбираются и подробно решаются те задания, которые вызывают у студентов наибольшие затруднения, требуют дополнительной проработки. По степени выполнения домашнего задания и активности на занятии каждый студент получает рейтинговый балл. В качестве учебно-методического обеспечения студентам предоставляются контрольные вопросы и указываются учебники и пособия из списка рекомендованного списка по отдельным разделам дисциплины.

Для контроля текущей успеваемости составлены задачи для решения, контрольные вопросы и задания для каждого семинарского занятия; для промежуточного контроля и итоговой аттестации по итогам освоения дисциплины составлены контрольные вопросы, билеты и тесты по всем разделам дисциплины.

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка реферата, презентации и доклада.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка реферата (до 10-15 страниц), презентации и доклада (25-30 минут)	Прием реферата, презентации, доклада и оценка качества их исполнения на мини конференции.	См. разделы 6.2 и 6.3, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашних задач.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
5.	Подготовка к зачету.	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка реферата, презентации и доклада.

2. Текущий контроль: решение задач.

3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу практических занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Для текущего контроля используется и такой вид самостоятельной работы как подготовка рефератов, содержание которых будет представлено публично на практическом занятии и сопровождается презентацией. Выбор темы реферата согласуется с лектором.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного зачета, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

6.2 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Тематика рефератов ежегодно подвергается пересмотру и обновлению соответственно появлению новых средств и методов работы с информацией. Предлагается следующий список рефератов, который может быть расширен и уточнен при обсуждении и конкретизации со студентами.

6.3. Примеры тем рефератов

1. Классическая теория химического строения. Структурная и пространственная изомерия. Энантиомерия, диастереомерия. Изомерия вращения.
2. Геометрическая конфигурация молекул. Теория отталкивания электронных пар валентных оболочек.
3. Элементы симметрии и операции симметрии. Точечные группы симметрии.
4. Приводимые представления, базисы представления. Неприводимые представления. Характеры НП точечных групп симметрии.
5. Разложение ПП в различных базисах на НП. Проекционные операторы.
6. Электрические свойства молекул. Поляризация веществ в статических и переменных электрических полях. Электрический дипольный момент.
7. Методы определения дипольного момента. Дипольный момент и симметрия молекул.
8. Магнитные свойства молекул. Зеемановское расщепление. Магнитный резонанс. Спектроскопия ЯМР и ЭПР. Применение в химии.
9. Вращательные состояния. Вращательные спектры. Определение межъядерных расстояний в молекулах.
10. Колебательные состояния. Колебательные спектры. Определение вращательных констант.
11. Сравнительное описание ИК-спектроскопии и спектроскопии КР. Их совместное использование в установлении симметрии молекул и колебаний.
13. Колебательно-вращательные спектры.
12. Электронные состояния и электронные переходы. Электронно-колебательные переходы, анализ Деландра. Флуоресценция и фосфоресценция.
14. Правила отбора в молекулярной спектроскопии, дипольный момент перехода, теоретико-групповой вывод.
15. Спектроскопия ЯМР. Спектры высокого разрешения. Применение в химии.
16. Спектроскопия ЭПР. Спектры сверхтонкого взаимодействия. Применение в химии.
17. Типы межмолекулярных взаимодействий. Различные потенциалы парных взаимодействий.
18. Нейтронография и рентгенография. Определение структурных параметров кристаллов и жидкостей.
19. Функции радиального распределения в жидкостях. Близкий и промежуточный порядок.
20. Структурные модели для жидкостей.
21. Типы кристаллических решеток и их дефектов.
22. Фононная теория кристаллов.
23. . Изменение структурных параметров при плавлении ионных кристаллов
24. Жидкие кристаллы. Классификация. Методы получения. Свойства.
25. Строение поверхности конденсированных фаз и межфазных границ.
26. Наночастицы, наноструктуры, углеродные наноструктуры и наноматериалы.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Компетенция	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
ОПК-1	Знать: основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач изучающего «Строение вещества» Уметь: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: теоретическими основами традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Круглый стол, деловая игра, устный опрос
ОПК-2	Знать: основные экспериментальные методы синтеза и исследования строения и анализа веществ и реакций Уметь: использовать современные методы синтеза, исследования и анализа химических веществ	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: владеть навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Круглый стол, деловая игра
ОПК-5	Знать: необходимую для поиска и анализа научную информацию для синтеза, анализа и исследования веществ Уметь: использовать имеющийся научный багаж для обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: навыками обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений с использованием современных научных методов.	Круглый стол, деловая игра, мини-конференция

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

ОПК-1 – “Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач ”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ОПК-1	Знать: основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Неполное понимание основ традиционных и новых разделов химии	Хорошее понимание: основ традиционных и новых разделов химии	Полное понимание основ традиционных и новых разделов химии
	Уметь: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Неполное умение воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных разделов химии	Достаточно полное умение принимать теоретические основы разделов химии при решении профессиональных задач	Полное умение воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
	Владеть: теоретическими основами традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Неполное владение теоретическим и основами традиционных и новых разделов химии	Владеет теоретическими основами традиционных и новых разделов химии	Владеет и успешно применяет теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач

ОПК-2 «Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций».

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ОПК-2	Знать: основные экспериментальные методы синтеза и исследования строения и анализа веществ и реакций	Знает некоторые экспериментальные методы синтеза и исследования строения и анализа веществ и реакций	Знает основные экспериментальные методы синтеза и исследования строения и анализа веществ и реакций	Знает многие экспериментальные методы синтеза и исследования строения и анализа веществ и реакций
	Уметь: использовать современные методы синтеза, исследования и анализа химических веществ	Удовлетворительно умеет использовать методы синтеза, исследования и анализа веществ	Хорошо умеет использовать методы синтеза, исследования и анализа химических веществ	Вполне умеет использовать методы синтеза, исследования и анализа веществ
	Владеть: навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Слабо владеет навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования веществ	Хорошо владеет навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования веществ	Вполне владеет навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования веществ

ОПК-5 «Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений».

	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительн о	Хорошо	Отлично
ОПК-5	Знать: необходимую для поиска и анализа научную информацию для синтеза, анализа и исследования веществ	Знает некоторую научную информацию для синтеза и анализа веществ	Хорошо знает значительную научную информацию для синтеза и анализа веществ	Знает полную научную информацию для поиска и анализа и исследования веществ
	Уметь: использовать имеющийся научный багаж для обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений	Недостаточны научный багаж и умение обрабатывать и анализировать научную информацию	Имеет неплохой научный багаж и умеет использовать научную информацию для формулировки выводов	Вполне успешно умеет использовать имеющийся багаж для научного анализа информации для формулировки выводов и предложений
	Владеть: навыками обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений с использованием современных научных методов.	Слабо владеет навыками обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений	Хорошо владеет : навыками обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений	Вполне владеет навыками обработки, анализа научной информации и формулировки на их основе выводов и предложений

7.3. Типовые контрольные задания.

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль, рубежный контроль по модулю и итоговой контроль. По учебному плану по дисциплине предусмотрен зачет. Оценка активности успешности студента по видам деятельности проводится по схеме: за выполнение домашнего задания-5 баллов, за активность на семинарном занятии -95 баллов. Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается из 100 баллов. Промежуточный контроль обеспечивается баллами, выводимыми как сумма $0.3x$ (средний балл за семинарские занятия в модуле) + $0.7x$ (баллы за промежуточный контроль). Итоговый контроль проводится в виде устного собеседования или тестирования и оценивается в 100 баллов. Шкала перевода рейтингового балла в 5-бальную: в диапазоне 51-65 баллов -

“удовлетворительно”, 66-80 балла - “хорошо” в диапазоне 80-100 баллов - “отлично”.

Контрольные вопросы к зачету

1. Макротела, микрочастицы, наночастицы. Двойственная природа света. Закон эквивалентности массы и энергии. Волны де Бройля.

Модель молекулы как единой динамической системы из ядер и электронов.

2. Химические связи, их типы; валентность эффективных атомов в молекуле, последовательность и кратность химических связей.

3. Квантовомеханическое объяснение строения одноэлектронных атомов.

4. Особенности строения многоэлектронных атомов. Атомные термы.

5. Перечислить все возможные значения квантовых чисел J и M_J для атома с указанным термом. Определить относительное расположение указанных атомных термов по энергетической шкале.

6. Химические связи, их типы; валентность эффективных атомов в молекуле, последовательность и кратность химических связей.

7. Квантовомеханическое объяснение ковалентной связи. Объяснение направленной валентности. Ординарные, двойные и тройные связи. Метод молекулярных орбиталей

8. Определить число стационарных состояний, в которых может находиться атом с заданной электронной конфигурацией, их термы.

9. Ионная связь. Энергия ионной связи. Поляризация ионов. Влияние поляризации на свойства веществ.

10. Типы изомерии ядерного скелета молекулы. Структурная изомерия. Пространственная изомерия. Динамическая изомерия молекул. Внутреннее вращение.

11. Координационная связь. Водородная связь, ее природа. Двухэлектронные трехцентровые связи с дефицитом электронов.

12. Равновесная геометрическая конфигурация молекул, способы ее описания. Параметры, определяющие геометрию молекулы, межъядерные расстояния, валентные углы, углы внутреннего вращения.

13. Теория Гиллеспи. Связь геометрической конфигурации молекулы с числом стереоактивных электронных пар и типом гибридизации.

14. Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии.

15. Привести примеры молекул, точечная группа симметрии которых содержит указанный набор операций симметрии. Указать расположение соответствующих элементов симметрии в молекуле.

16. Энергетические характеристики молекул. Парциальная энергия химической связи. Постоянство энергий связей одного вида в любых молекулах. Расчет энергий образования молекул полуэмпирическими методами (аддитивная схема).

17. Поляризация веществ в статическом и переменном электрических полях. Уравнения Клаузиуса – Мосотти, Дебая - Ланжевена и Лорентц – Лоренца.

18. Индуцированный дипольный момент и поляризуемость молекулы. Связь дипольного момента и поляризуемости с макроскопическими характеристиками веществ (диэлектрической проницаемостью и показателем преломления). Молярная рефракция

19. Электрический дипольный момент в классической теории и квантовой механике. Полярные и неполярные вещества. Дипольный момент и структура молекулы.

20. Парциальные дипольные моменты связей и структурных групп. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов.

21. Элементы симметрии и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Дипольный момент и симметрия молекулы.

22. Таблицы умножения операций симметрии. Преобразования подобия. Классы сопряженных элементов.

23. Приводимые и неприводимые представления. Характеры неприводимых представлений точечных групп симметрии.

24. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Магнитная поляризация. Магнитный резонанс.

25. Магнитные моменты ядер и электронов. Условие ядерного магнитного резонанса. ЯМР. Химический сдвиг. Спин-спиновое расщепление.

26. Использование спектров ЯМР в структурных исследованиях.

27. Условие электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Свободные радикалы и другие парамагнитные частицы и центры. G-фактор. Взаимодействие электронных и ядерных спинов.

28. Полная энергия молекулы. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии молекулы. Поглощение и испускание излучения Молекулярная спектроскопия.

29. Вращательные состояния двухатомной и многоатомных молекул в приближениях жесткого и нежесткого ротатора. Момент количества движения и кинетическая энергия вращения. Линейные молекулы, молекулы типов сферического, симметричного и асимметричного волчков.

30. Определение вращательных констант, момента инерции, межъядерных расстояний.

31. Степени свободы молекул. Колебательные степени свободы. Нормальные колебания. Симметрия колебаний.

32. Колебательные состояния двухатомной и многоатомных молекул в приближениях гармонического и ангармонического осцилляторов. Потенциал Морзе.

33. Определить число нормальных колебаний указанной молекулы. Изобразить схемы нескольких валентных и деформационных нормальных колебаний.

34. Привести примеры молекул, точечная группа симметрии которых содержит указанный набор операций симметрии. Указать расположение соответствующих элементов симметрии в молекуле

35. ИК-спектры. Спектры комбинационного рассеяния. Применение колебательных спектров для идентификации веществ, установления симметрии молекул, изучение химических равновесий.

36. Электронные состояния. Классификация электронных состояний двухатомных и многоатомных молекул. Различия свойств молекул в различных электронных состояниях.

37. Электронно-колебательные спектры. Анализ Деландра. Определение энергий диссоциации молекул в основном и электронно-возбужденном состояниях. Указать особенности строения молекулы, о которых можно получить информацию заданным экспериментальным методом (электронная спектроскопия, УФ-, ИК- и КР-спектроскопия, ЯМР-спектроскопия и др.).

38. Указать экспериментальные методы, с помощью которых можно получить информацию о некоторых особенностях строения молекулы (геометрическая форма, энергетическая диаграмма, симметрия и др.)

39. Описать изменения в энергии частицы, находящейся в потенциальной яме в результате изменений в форме потенциальной ямы. Описать изменения в энергии

40. Правила отбора для спектров испускания, поглощения и комбинационного рассеяния. Теоретико-групповой анализ.

41. Физические методы определения структуры молекул. Электронография. Молекулярные спектры, спектры ЯМР.

42. Агрегатные состояния. Межмолекулярное взаимодействие.

43. Кулоновское, борновское, ориентационные, индукционное и дисперсионное взаимодействия. Потенциальные функции для парных межмолекулярных взаимодействий.

44. Межмолекулярные взаимодействия. Уравнения Ми, потенциалы Морзе, 12-6, 9-6, Борна – Майера- Хиггинса, Фуми-Този.

45. Дифракционные методы исследования структуры вещества. Парные функции радиального распределения. Определение структурных параметров веществ в конденсированных фазах.

46. Кристаллическое состояние. Особенности кристаллического состояния. Исследование структуры кристаллов. Типы кристаллических решеток. Типы дефектов кристаллических решеток.

47. Энергетика ионных кристаллов. Дефекты Шоттки и Френкеля. Взаимодействие дефектов. Плавление кристаллов. Изменение структурных параметров при плавлении.

48. Жидкое и аморфное состояния. Строение жидкостей. Структура жидкой воды. Растворы электролитов. Ближний и промежуточный порядок

49. Жидкие кристаллы, смектики, нематики, холестерики. Жидкокристаллическое состояние в живых организмах.

50. Особенности строения поверхности конденсированных фаз. Структура границы раздела конденсированных фаз. ДЭС. адсорбция ПАВ.

Для итогового контроля составлены также тесты для компьютерного тестирования, билеты для письменного зачета; они приведены в приложении к УМК.

Примерные тестовые задания

Модуль 1. Строение и симметрия молекул

1. Ионная связь осуществляется в результате:
 - 1) образования общей электронной пары
 - 2) перехода электронной пары от одного атома на свободную орбиталь другого атома
 - 3) сил электростатического притяжения между ионами
 - 4) смещения электронной пары от одного атома к другому

2. Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи встречается в молекуле:
 - 1) H_2O
 - 2) CO_2
 - 3) CO
 - 4) BCl_3

3. В соединении $\text{NH}_3 \cdot \text{BF}_3$ химическая связь осуществляется за счет:
 - 1) образования ионной связи
 - 2) спаривания электронов азота и бора
 - 3) перехода пары электронов от азота на свободную орбиталь бора
 - 4) сил межмолекулярного взаимодействия

4. Среди приведенных молекул и ионов определите ту, которая может быть акцептором при образовании ковалентной связи по донорно-акцепторному механизму:
 - 1) NH_3
 - 2) Al^{3+}
 - 3) NH_4^+
 - 4) H_2O

5. Среди предложенных молекул выберите ту, центральный атом которой находится в sp^3 - гибридизации:
 - 1) BCl_3
 - 2) H_2Se
 - 3) BeH_2
 - 4) ZnCl_2

6. Среди предложенных молекул и ионов выберите те, геометрическая структура которых представляет собой тетраэдр: 1) XeF_4 , 2) SO_4^{2-} , 3) NH_4^+ , 4) BrF_4^- .
 - 1) 1 и 2
 - 2) 2 и 3
 - 3) 2 и 4
 - 4) 3 и 4

7. В каком из предложенных соединений возможно образование между атомами ковалентной связи по донорно-акцепторному механизму:
 - 1) NH_3
 - 2) AlCl_3
 - 3) CO
 - 4) CO_2

8. Среди предложенных молекул выберите те, где атом углерода находится в sp -гибридизации:

- 1) C_2H_2, C_2H_4 2) C_2H_6, HCN 3) CO_2, CH_4 4) C_2H_2, CO_2
9. Химические связи ненаправлены и ненасыщены при стандартных условиях в молекулах:
- 1) $CCl_4, NaCl$ 2) $LiCl, AuCs$ 3) CO_2, H_2O 4) AgF, FCl

10. Используя метод Гиллеспи, определите молекулу, в которой углы между связями равны 90° :
- 1) SCl_4 2) ICl_3 3) IF_5 4) XeF_4

11. Какая из молекул, приведенных ниже, имеет $C_2 \perp C_n$?
- 1) BCl_3 2) BrF_3 3) SO_2 4) CO_2

12. Какая из молекул относится к точечной группе $D_{\infty h}$?
- 1) CO_2 2) SO_2 3) BrF_3 4) BCl_3

13. Какой из приведенных ионов имеет плоское строение?
- 1) CO_3^{2-} 2) SO_3^{2-} 3) SO_4^{2-}

- 14) К каким группам симметрии относятся молекулы, имеющие собственные дипольные моменты?
- 1) C_n, C_{nv} . 2) D_n, D_{nh}, D_{nd} . 3) T_d, O_h, I_h 4) $D_{\infty h}, D_{nh}, C_{2h}$

15. Разложите приводимое представление $\Gamma : 9(E); -1(C_2); 3\sigma_V(xz); 1\sigma_V(yz)$ на неприводимые представления точечной группы молекулы воды

- 1) $\Gamma = 2A_1 + 2A_2 + 2B_1 + 3B_2$ 2) $\Gamma = 2A_1 + 3A_2 + B_1 + 3B_2$
- 3) $\Gamma = A_1 + 3A_2 + 2B_1 + 3B_2$ 4) $\Gamma = 3A_1 + A_2 + 3B_1 + 2B_2$

16. Если \hat{L} - оператор скалярной величины, то в каком случае матричный элемент $L_{mn} = \int \psi_m^{(j)} \hat{L} \psi_n^{(i)} d\nu$ отличен от нуля?

- 1) В случае, если $\Gamma_j = \Gamma_i$ 2) Если $\Gamma_j = \Gamma_L$
- 3) Если $\Gamma_j = A_1$ 4) Если $\Gamma_i = \Gamma_L$

Модуль 2. Электрические и спектроскопические свойства молекул

1. При рассмотрении спектров какого типа необходимо учитывать принцип Франка-Кондона?

- 1) ИК-. 2) вращательных. 3) КР-. 4) электронных.

2. В каких областях спектра проявляются переходы между электронными, колебательными и вращательными состояниями молекул?

- 1) Колебательные - в ИК-области, вращательные - в УФ-области, электронные - в микроволновой.
- 2) Колебательные - в микроволновой, электронные - в УФ-области, вращательные - в ИК-области.
- 3) Колебательные - в ИК-области, вращательные - в микроволновой, электронные - в УФ-области.
- 4) Колебательные - в УФ-области, электронные - в ИК-области, вращательные - в микроволновой. В молекуле этилена при облучении УФ-светом возможны электронный переход наименьшей энергии:

3. Колебательные спектры возникают при взаимодействии вещества:

- 1) с гамма-излучением; 2) с видимым светом; 3) с радиоволнами
- 4) с ИК-излучением; 5) с УФ-излучением

4. Инфракрасным спектрам поглощения соответствуют:

- 1) электронные переходы из основного в возбужденное состояние;
- 2) колебательные переходы из основного в возбужденное состояние;
- 3) электронные переходы из возбужденного в основное состояние ;
- 4) вращательные переходы из основного в возбужденное состояние.

5. Комбинационным рассеянием называется рассеяние света:

- 1) без изменения частоты; 2) с увеличением частоты;
- 3) с уменьшением частоты ; 4) с изменением частоты.

6. Какие колебания молекулы CO_2 проявляются в ИК-спектре, а какие в КР-спектре?

- 1) Полносимметричное активно в КР-спектре, а деформационное валентное колебание в ИК-спектре;
- 2) Все колебания активны ИК- и КР-спектрах.
- 3) Полносимметричное валентное колебание в ИК-спектре и антисимметричное в КР-спектре.
- 4) Все колебания активны только в ИК-спектре .

7. Сколько поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы у тетраэдрической молекулы CH_4 ?

- 1) Поступательных - 3, вращательных - 3, колебательных - 9.
- 2) Поступательных - 3, вращательных - 2, колебательных - 10.
- 3) Поступательных - 3, вращательных - 3, колебательных - 3.
- 4) Поступательных - 3, вращательных - 3, колебательных - 5.

8. Укажите характерные особенности колебательных спектров (ИК- и КР-) при-веденных ниже молекул:

- 1) Cl_2 ; 2) HCl ; 3) CO ;
- 4) $\text{CF}_2=\text{CH}_2$ (только валентные колебания двойной связи);

5) $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$ (только валентные колебания двойной связи).

9. Отличаются ли энергии диссоциации изотопных молекул, например H_2 и D_2 ?

- 1) Энергии диссоциации одинаковы.
- 2) На вопрос ответить нельзя, так как не приведены данные об их частотах колебаний и ангармоничности.
- 3) Энергия диссоциации у D_2 больше, чем у H_2 .
- 4) Энергия диссоциации у H_2 больше, чем у D_2 .

10. Проявляются ли (активны ли) колебания полярных двухатомных молекул (например HCl) в ИК-спектрах и спектрах КР?

- 1) Проявляются только в ИК-спектрах.
- 2) Проявляются только в КР-спектрах.
- 3) Проявляются в ИК-спектрах и в спектрах КР.
- 4) Не проявляются ни в ИК-спектрах, ни в спектрах КР.

11. Спектрам поглощения в ультрафиолетовой области спектра соответствуют:

- 1) электронные переходы из основного в возбужденное состояние;
- 2) колебательные переходы из основного в возбужденное состояние;
- 3) электронные переходы из возбужденного в основное состояние ;
- 4) вращательные переходы из основного в возбужденное состояние.

12. Электронные переходы в молекулах проявляются в ультрафиолетовой и видимой областях спектра примерно от 100 до 1000 нм. Какова энергия этих переходов в см^{-1} ?

- 1) 10 – 100 2) 100 – 1000 3) 10000 – 100000 4) 10 – 100000.

13. Электронные спектры возникают при взаимодействии вещества:

- 1) с гамма-излучением;
- 2) с видимым светом;
- 3) с радиоволнами;
- 4) с ИК-излучением;
- 5) с УФ-излучением.

14. Какие электронные переходы запрещены по спину:

- 1) синглет-синглетные;
- 2) синглет-триплетные;
- 3) триплет-триплетные;
- 4) для электронных переходов нет запрета по спину.

15. Какова мультиплетность электронного состояния молекулы, при котором спины двух электронов параллельны:

- 1) $1/2$ 2) 1 3) 2 4) 3.

16. Среди приведенных ниже групп найдите ауксохромы :

- 1) $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O}$; 2) $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}$; 3) $-\text{NH}_2$; 4) $\text{C}=\text{C}$; 5) $\text{C}=\text{O}$; 6) $-\text{OH}$.

18. Увеличение цепи сопряжения полиенов приводит в УФ-спектре к:

- 1) батохромному сдвигу и гипохромному эффекту;

- 2) батохромному сдвигу и гиперхромному эффекту;
- 3) гипсохромному сдвигу и гипохромному эффекту;
- 4) гипсохромному сдвигу и гиперхромному эффекту.

17. Какие из приведенных ниже ядер не обладают магнитными свойствами:

- 1) ^{12}C и ^{13}C ;
- 2) ^{12}C и ^{14}N ;
- 3) ^{12}C и ^{16}O ;
- 4) ^{19}F и ^{31}P .

18. ЯМР спектр хлорэтана будет содержать

- 1) один пик,
- 2) два пика равных интенсивностей,
- 3) более интенсивный кватрплет и менее интенсивный триплет,
- 4) более интенсивный триплет и менее интенсивный кватрплет.

19. Сколько сигналов ПМР и с каким соотношением интенсивностей содержит спектр и метиленциклопропена?

- 1) три сигнала 2:1:1.
- 2) два сигнала 2:1.
- 3) два сигнала 1:1.
- 4) один сигнал

20. Сколько сигналов содержат спектры а) циклобутана и б) метиленциклопропена?

- 1) а-4, б-1.
- 2) а -2, б-1.
- 3) а-1, б-4.
- 4) а-1, б-2

21. Величина константы спин-спинового взаимодействия

1. Определяется напряженностью внешнего магнитного поля
2. Является внутренним свойством спиновой системы
3. Измеряется в миллионных долях
4. Не зависит от рабочей частоты ЯМР-спектрометра
5. Зависит от рабочей частоты ЯМР-спектрометра

22. Собственный магнитный момент элементарных частиц обусловлен

1. их спином
2. их зарядом
3. внешним магнитным полем
4. природой мироздания орбитальным магнитным моментом

Модуль 3. Структурная нейтронография, электронография и рентгенография. Строение конденсированных сред

1. Каким методом получают наиболее точную информацию о структуре жидкостей?

- 1) Нейтронографическим методом;
- 2) Рентгеновским методом;
- 3) Электронографическим методом;
- 4) ИК- спектроскопическим методом.

2. Какими способами определяют симметрию комплексов в жидкостях?

- 1) ИК- и КР- методами
- 2) Нейтронографическим и рентгенографическим методами;

- 3) МК- и УФ- спектроскопическими методами
4) Электронографическим методом.

3. Какими методами определяют структурные параметры кристаллов и жидкостей?

- 1) Нейтронографическим методом; 2) Рентгеновским методом;
3) Электронографическим методом 4) ИК- спектроскопическим методом.

4. Координационные числа характерны для:

- 1) Кристаллов и жидкостей; 2) Только для кристаллов;
3) Только жидкостей; 4) Для жидкостей и газов.

5. Какими методами подтверждается наличие в жидкости пространственного упорядочения молекул?

- 1) Дифракционными; 2) спектроскопическими
3) Рефрактометрическим; 4) Диалькометрическим;

6. Если первый координационный радиус кристалла NaCl $r_{+-} = 2,95 \text{ \AA}$, каким стал в расплаве?

- 1) Уменьшился 2) r_{+-} 3) Увеличился 4) Сохранился неизменным

7. Конечность (ограниченность) объема реальных тел обусловлено:

- 1) Силами отталкивания 2) Кулоновскими силами
3) Диполь-дипольным взаимодействием 4) Дисперсионными силами

8. Энергия ион-ионного взаимодействия по величине пропорциональна:

- 1) r^{-1} 2) r^{-2} 3) r^{-3} 4) r^{-4}

9. Энергия ион-дипольного взаимодействия по величине пропорциональна:

- 1) r^{-2} 2) r^{-4} 3) r^{-1} 4) r^{-3}

10. Энергия диполь-дипольного взаимодействия по величине пропорциональна:

- 1) r^{-3} 2) r^{-1} 3) r^{-2} 4) r^{-4}

11. Взаимодействия между молекулами воды преимущественно являются:

- 1) Ориентационными 2) Кулоновскими
3) Дисперсионными 4) Индукционными

12. При плавлении большинства кристаллов:

- 1) Первое координационное число уменьшается
2) Первое координационное число увеличивается
3) Первое координационное число не изменяется
4) Строение конденсированных сред

12. Частицы в молекулярных кристаллах удерживаются:

- 1) силами Ван-дер-Ваальса;
- 2) электрическим диполь-дипольным взаимодействием;
- 3) кулоновским взаимодействием;
- 4) магнитными взаимодействиями
- 5) Спин-орбитальным взаимодействием.

13. Укажите вещества с молекулярной кристаллической решеткой в твердом состоянии:

- | | | |
|----------------------|-----------|----------------------|
| 1) Сульфид углерода; | 2) Бром; | 3) Диоксид углерода; |
| 4) Сульфид бария; | 5) Графит | 6) Оксид меди; |

14. Сколько существует различных точечных групп для пространственных решеток?

- | | | | |
|------|------|------|-------|
| 1) 4 | 2) 6 | 3) 7 | 4) 14 |
|------|------|------|-------|

15. Какая сингония характеризуется элементарной ячейкой с углами

$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ между осями и соотношением длин этих осей $a = b = c$?

- | | |
|--------------------|-----------------|
| 1) Орторомбическая | 2) Тригональная |
| 3) Кубическая | 4) Моноклинная |

16. Укажите вещества с молекулярной кристаллической решеткой:

- | | | |
|------------------|---|---------------|
| 1) С (алмаз), BN | 2) H ₂ O(тв), S ₈ | 3) NaCl, CsCl |
| 4) Ag, Cu | | |

17. Укажите вещество с молекулярной кристаллической решеткой:

- | | | | |
|--------------|---------|-------------------|-------|
| 1) С (алмаз) | 2) CsCl | 3) I ₂ | 4) Au |
|--------------|---------|-------------------|-------|

18. Частицы в молекулярных кристаллах удерживаются:

- | | |
|-----------------------------------|---------------------------------|
| 1) силами Ван-дер-Ваальса; | 2) кулоновским взаимодействием |
| 3) Индукционными взаимодействиями | 4) магнитными взаимодействиями. |

19. Способность веществ образовывать разные типы кристаллических решеток называют:

- | | | |
|------------------|-----------------|---------------|
| 1) Полиморфизмом | 2) Анизотропий; | 3) Текстурой. |
|------------------|-----------------|---------------|

20. Аморфные материалы отличаются тем, что в них:

- 1) отсутствует трансляционная симметрия;
- 2) нет дальнего порядка;
- 3) Отсутствует ближний порядок;
- 4) Присутствует дальний порядок.

21. Выберите правильное определение жидких кристаллов (ЖК):

- 1) ЖК- это вещества, обладающие одновременно свойствами как жидкостей, так и кристаллов;

- 2) ЖК- это гетерогенная смесь кристаллов и жидкостей;
- 3) ЖК- это кристаллы. обладающие текучестью;
- 4) ЖК- это жидкости, обладающие ближним порядком.

22. Какими характерными свойствами обладают жидкие кристаллы?

- 1) Текучестью 2) Анизотропией;
- 3) Они состоят из сферических молекул.
- 4) Они состоят комплексов.

23. Укажите правильное утверждение:

- 1) Жидкие кристаллы (ЖК) не обладают дальним порядком, их молекулы имеют стержнеобразную или дискообразную форму;
- 2) ЖК обладают дальним порядком, их молекулы имеют стержнеобразную или дискообразную форму;
- 3) ЖК состоят из стержнеобразных молекул и обладают дальним порядком в расположении молекул;
- 4) ЖК состоят из дискообразных молекул и обладают дальним порядком в расположении молекул
- 5) ЖК обладают и ближним порядком и дальним порядком.

24. Какова химическая природа фуллеренов?

- 1) Фуллерены — молекулярные соединения, принадлежащие классу аллотропных форм углерода, как и другие — алмаз, карбин и графит;
- 2) Фуллерены это смесь карбина и графита;
- 3) Фуллерены - системы, состоящие из фуллеритов;
- 4) Фуллерены- соединения углерода с кремнием.

25. Назовите двумерные кристаллы

- 1) Графен 2) Фуллерен; 3) Фуллерит; 4) Графит.

26. Назовите материал с максимальной подвижностью электронов среди всех известных материалов.

- 1) Графен; 2) Фуллерен; 3) Фуллерит; 4) Медь
- 5) Графит.

27. В каком состоянии sp -гибридизации находятся и какими связаны соединены атом углерода в графене?

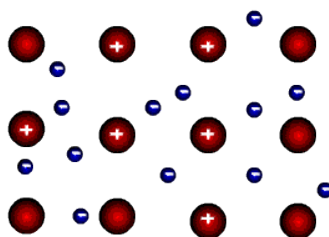
- 1) В состоянии sp^2 -гибридизации и соединяются σ - и π -связями;
- 2) В состоянии sp -гибридизации и соединяются π -связями;
- 3) В состоянии sp^3 -гибридизации и соединяются σ -связями;
- 4) В состоянии sp^2 -гибридизации и соединяются π -связями.

28. При переходе в состояние с суперионной проводимостью:

- 1) изменяется тип кристаллической решетки;
- 2) Плавится одна подрешетка;

- 3) кристаллическая решетка не участвует;
- 4) Плавятся катионная и анионная подрешетки.

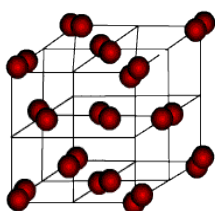
29. Ниже приведена кристаллическая решетка:



У какого вещества может быть такая решетка?

- 1) У металла
- 2) NaCl
- 3) SiC
- 4) LiH.

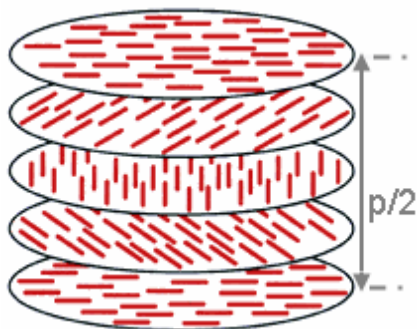
30. Ниже приведена кристаллическая решетка:



У какого вещества может быть такая решетка?

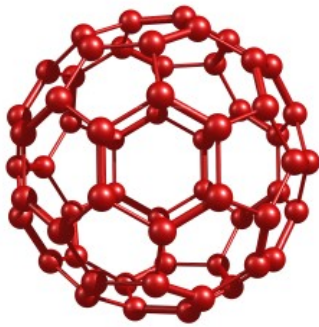
- 1) J₂
- 2) CO₂
- 3) LiF
- 4) LiH
- 5) SiC

31. Структура каких жидких кристаллов (ЖК) приведена на рисунке?

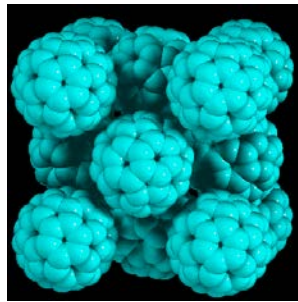


- 1) Холестерических ЖК
- 2) Нематических ЖК
- 3) Сметических ЖК
- 4) Дискотических ЖК

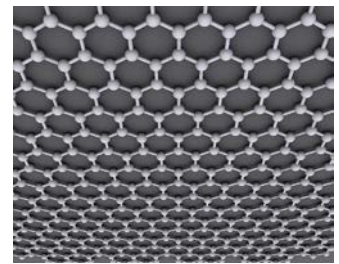
32. Назовите приведенные на рисунке структуры



А



Б



В

- 1) А- фуллерен, Б- фуллерит, В- графен
- 2) А- графен, Б-фуллерен, В-фуллерит;
- 3) А-фуллерит, Б-графен, В- фуллерен;
- 4) А-фуллерен, Б- фуллерит, В- холестерический ЖК.

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

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 5 баллов,
- участие на практических занятиях - 70 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 30 баллов,
- тестирование - 30 баллов.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) основная литература:

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: «Мир», 2006. 683 с.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Академия, 2008. 383 с.
http://www.academia-moscow.ru/ftp_share/_books/fragments/fragment_20477.pdf
3. Шабанов О.М., Рабаданов М.Х. Строение вещества. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2011.
4. Ролдугин В.И. Физикохимия поверхности. М.: «Интеллект». Долгопрудный, 2008.
6. Шабанов О.М. Строение расплавленных солей ИПЦ ДГУ, Махачкала. 2006. 65 с.

7. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. Бином, 2008. 398 с.

б) дополнительная литература:

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на Дону.: Феникс, 1997.
2. Симкин Б.Я., и др. Задачи по теории строения молекул. Ростов на Дону.: Феникс, 1997.
3. Драго Р.М. Физические методы в химии: «Мир», 1981.
4. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М.: «Мир», 1983.
5. Вигнер Е. Теория групп и ее приложения в теории атомных спектров. М.: «ИЛ», 1961.
6. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. М.: «Мир», 1975.
7. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф. Теория групп и ее применение в квантовой механике молекул. Vilnius, "Elcom", 1999.
8. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1972.
9. Хабердитцл В. Строение материи и химическая связь. М.: Мир, 1974.
10. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. Махачкала: «Эпоха», 2003.
11. Шабанов О.М. Строение и симметрия молекул. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 1985.
12. Шабанов О.М. Теория точечных групп симметрии. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2004.
13. Правила отбора в молекулярной спектроскопии. ИПЦ ДГУ, Махачкала, 2002.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Электронные образовательные ресурсы образовательного сервера ДГУ elib.dgu.ru
2. <http://www.biblioclub.ru>
3. Образовательные ресурсы Интернета – Химия,
4. Каталог образовательных интернет-ресурсов <http://www.edu.ru/>
5. Химический каталог: Химические ресурсы Рунета <http://www.ximicat.com/>
6. Портал фундаментального химического образования России <http://www.chemnet.ru>
7. XuMuK: сайт о химии для химиков <http://www.xumuk.ru/>
8. Химические серверы <http://www.Himhelp.ru>, ChemWeb, ChemExpress Online, ChemNet.com

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или

его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Разделы и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание для самостоятельной работы
Раздел 1. Строение и симметрия молекул Тема 1. Основы классической и квантовой теорий химического строения	Теории Бутлера, Вант-Гоффа. Валентная изомерия, структурная изомерия, стереоизомерия, конформация. Линейная комбинация атомных орбиталей, метод Хюккеля. Теория валентных связей. Электронные параметры атомов и связей.
Тема 2. Геометрия и симметрия молекул. Точечные группы симметрии.	Теория отталкивания электронных пар Гиллеспи. Геометрическая структура молекул. Элементы симметрии и операции симметрии.
Раздел 2. Электрические и спектроскопические свойства молекул Тема 1. Поляризация веществ. Поляризуемость и дипольмомент молекул	Поляризация неполярных и полярных молекул в постоянном и переменном электрических полях. Уравнения Клаузиуса-Мосотти, Дебая-Ланжевена. Определение молекулярных диполей молекул по поляризации.
Тема 2. Оптическая спектроскопия МК, ИК, КРС, ЭС	Микроволновая, инфракрасная и Рамановская спектроскопия. Определение молекулярных констант. Правила отбора переходов в различных видах спектроскопий, применение теории групп симметрии. Вибронные переходы
Раздел 3 Структурная дифрактометрия. Строение конденсированных фаз Тема 1. Потенциалы парного взаимодействия. Функции радиального распределения.	Возможные виды межмолекулярных взаимодействий. Их обобщение, уравнения Ми, 9-6 и 12-6. Получение функции Морзе из потенциала Леннарда-Джонса.
Тема 2. Структурная дифрактометрия	Дифракция электронов и рентгеновских лучей. Функция распределения. Определение структурных параметров рентгенографическим методом. Парциальные функции радиального распределения атомов и ионов в кристаллах и жидкостях. Определение структурных параметров.
Тема 3. Строение кристаллов, жидкостей и мезофаз. Поверхностные свойства конденсированных фаз	Атомные, молекулярные, ионные кристаллы. Классификация решеток по симметрии. Функции радиального распределения в жидкостях. Классификация ЖК, смектики, нематики, дискотические структуры. Применение жидких кристаллов. Структура поверхности кристаллов. Дефекты поверхности. Потенциал поверхности на границе с газом

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Строение вещества» используются следующие информационные технологии:

- Занятия компьютерного тестирования.
- Демонстрационный материал применением проектора и интерактивной доски.
- Компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа.
- Программы пакета Microsoft Office

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

В соответствии с требованиями ФГОС ВПО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).