

*Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего  
образования «Северо-Осетинский государственный университет имени Коста  
Левановича Хетагурова»*



проректор по учебной работе  
А.М. Дигурова

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

### **«Строение молекул и основы квантовой химии»**

**Направление 44.03.05 Педагогическое образование**

**(с двумя профилями подготовки)**

**Профили Химия, Биология**

**Квалификация (степень) выпускника – бакалавр**

**Форма обучения - очная**

Владикавказ 2019

Программа составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом по направлению (специальности) 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) Профили Химия, Биология, утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22.02.2018 N 125, учебным планом подготовки бакалавра по направлению 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) Профили Химия, Биология, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «СОГУ» (протокол № 10 от 28.05.2019 г.).

Составитель: к.х.н., старший преподаватель А.Т. Плиева

Рабочая программа обсуждена и утверждена на заседании кафедры органической химии

(протокол от «28» июня 2019 г. № 11).

Зав. кафедрой  В.Т. Абаев

Одобрена советом факультета химии, биологии и биотехнологии  
(протокол от «01» июля 2019 г. № 12)

Председатель совета факультета  Ф.А. Агаева

## 1. Структура и общая трудоемкость дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 часа).

	Очная форма обучения	Заочная форма обучения
Курс	4	
Семестр	7	
Лекции	18	
Практические (семинарские) занятия	18	
Лабораторные занятия	-	
Консультации	-	
Итого аудиторных занятий	36	
Самостоятельная работа	36	
Курсовая работа	-	
Форма контроля		
экзамен	-	
зачет	+	
Общее количество часов	72 (2 з.е.)	

## 2. Цели освоения дисциплины

Целью освоения учебной дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии», являющейся частью ОПОП по направлению 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) профили Химия, Биология и обеспечивающей реализацию ФГОС 3++ по данному направлению, является вооружить студентов системой теоретических знаний. Выделить главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки, способствовать приобретению студентами знаний по основным вопросам строения вещества, химической связи, межмолекулярных взаимодействий, понятий теории строения молекул, геометрических характеристик многоатомных молекул.

### Задачи изучения дисциплины:

- формирование способности понимать строение молекул и использовать основные законы квантовой химии в профессиональной деятельности;
- развитие творческого мышления, объединение фундаментальных знаний основ квантовой химии и метода моделирования при проведении практических занятий с последующей обработкой и анализом результатов исследований;
- формирование общего химического мировоззрения и развитие химического мышления, логического и абстрактного мышления, приемов учебной и познавательной деятельности и т.д.;
- изучение основных понятий и положений дисциплины «Строение молекул с основами квантовой химии» в соответствии с образовательной программой;
- показать какими способами и путём каких приближений можно подойти к интерпретации молекулярных спектров: электронных, колебательных, вращательных, спектров ядерного магнитного резонанса, электронного парамагнитного резонанса и других.

## 3. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» в соответствии с ФГОС 3++ по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) профили Химия, Биология включена в вариативную часть профессионального цикла Б1.В.ДВ.06.01. К исходным требованиям, необходимым для изучения дисциплины, относятся

Положение о разработке и реализации ОПОП СОГУ

знания, умения и навыки, сформированные в результате изучения дисциплин: «Физика», «Общая и неорганическая химия». Дисциплина является основой для изучения курсов «Избранные главы органической химии», «Органический синтез», «Неорганический синтез».

Для освоения учебной дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» у студента должны быть сформированы следующие, предварительные, компетенции:

**Универсальные компетенции:**

- способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач (УК-1);

**Общепрофессиональные компетенции (ОПК):**

- способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием (ОПК-2);

- способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);

- способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач. (ОПК-4);

- способен осуществлять педагогическую деятельность на основе специальных научных знаний (ОПК-8);

**Профессиональные компетенции:**

- способен организовывать совместную и индивидуальную учебную и воспитательную деятельность обучающихся, в том числе с особыми образовательными потребностями, в соответствии с требованиями ФГОС (ПК-3);

- способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации (ПК-4);

- способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности веществ под руководством специалиста более высокой квалификации (ПК-5).

#### **4. Требования к результатам освоения дисциплины (компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля))**

Процесс изучения дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» направлен на формирование следующих компетенций:

**Универсальные компетенции (УК)**

1. К категории «Системное и критическое мышление» относится **УК-1**: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

**Профессиональные компетенции (ПК)**

1. К категории «Разработка и реализация образовательных программ общей средней школы, СПО и программ ДО» относится **ПК-3**: Способен организовывать совместную и индивидуальную учебную и воспитательную деятельность обучающихся, в том числе с особыми образовательными потребностями, в соответствии с требованиями ФГОС.

- **Знать** основные понятия, определения и законы курса квантовой механики и квантовой химии, основы современной теории химического строения молекул, виды химической связи, строение многоатомных молекул;

- **Уметь** применять их для решения конкретных задач, строить энергетические диаграммы МО ЛКАО и модели электронного строения атомов и молекул.

- **Владеть** навыками самостоятельной работы с учебной, методической и научной литературой в области квантовой механики и квантовой химии.

### **В категории «Системное и критическое мышление» УК-1:**

**Знать:** методы критического анализа и оценки современных научных достижений; основные принципы критического анализа (**ИУК 1.1.**)

**Уметь:** получать новые знания на основе анализа, синтеза и других методов; собирать данные по сложным научным проблемам, относящимся к профессиональной области; осуществлять поиск информации и решений на основе экспериментальных действий (**ИУК 1.2.**)

**Владеть:** навыками исследования проблем профессиональной деятельности с применением анализа, синтеза и других методов интеллектуальной деятельности; выявления научных проблем и использования адекватных методов для их решения; демонстрирования оценочных суждений в решении проблемных профессиональных ситуаций (**ИУК 1.3.**).

### **В категории «Разработка и реализация образовательных программ общей средней школы, СПО и программ ДО» ПК-3 (ПС:01.001, 01.003,01.004):**

**Знать:** как проектировать диагностируемые цели (требования к результатам) совместной и индивидуальной учебной и воспитательной деятельности обучающихся, в том числе с особыми образовательными потребностями, в соответствии с требованиями ФГОС (**ИПК-3-1.**)

**Уметь:** использовать педагогически обоснованные содержание, формы, методы и приемы организации совместной и индивидуальной учебной и воспитательной деятельности обучающихся (**ИПК-3-2.**), управлять учебными группами с целью вовлечения обучающихся в процесс обучения и воспитания, оказывать помощь и поддержку в организации деятельности ученических органов самоуправления (**ИПК-3-3.**)

**Владеть:** умением осуществлять педагогическое сопровождение социализации и профессионального самоопределения обучающихся (**ИПК-3-4.**)

## 5. Содержание и учебно-методическая карта дисциплины

Таблица 5.1

Номер недели	Наименование тем (вопросов), изучаемых по данной дисциплине	Занятия		Самостоятельная работа студентов		Формы контроля	Количество баллов		Перечень компетенций	Литература
		л	пр	Содержание	Часы		min	max		
1.	Основные положения квантовой химии.	2	2	Свойства квантово-механических операторов. Нахождение собственных значений и собственных функций операторов.	4	Вопросы и задания к семинарскому занятию.	0	4	УК-1	[1], [2], [3], [4], [14]
2.	Квантовая теория образования химических связей	2	2	Понятие о волновой функции. Квантовые состояния и волновые функции. Основные свойства функций. Квантовые числа. Эффекты Штарка и Зеемана.	4	Вопросы к контрольной работе. Задачи и упражнения	0	4	УК-1	[1], [2], [3], [4], [13], [14], [15]
3	Адиабатическое приближение и понятие поверхностях потенциальной энергии слоя. Уравнение Шредингера.	2	2	Задачи о движении частицы по окружности, барьеру и гармоническом осцилляторе.	4	Вопросы к контрольной работе. Задачи и упражнения	0	4	УК-1	[1], [2], [3], [4],[14]
4	Расчетные методы квантовой химии: неэмпирические и полумэмпирические	2	2	Задачи об одномерных и трёхмерных потенциальных ящиках.	4	Вопросы к контрольной работе. Задачи и упражнения	0	4	УК-1	[1], [2], [3], [4],[14]
5	Строение и свойства сопряженных молекул координационных соединений: теория МО и теория полилигандов	2	2	Построение атомно-орбитальных моделей молекул. Решение задач.	4	Вопросы к контрольной работе. Задачи и упражнения	0	5	УК-1	[1], [2], [3], [4],[13],[14]
6	Квантовая теория химических реакций	2	2	Задачи построения молекул в терминах МО	4	Вопросы к контрольной работе. Задачи и упражнения	0	5	УК-1	[1], [2], [3], [4],[14], [15], [16]
7	Геометрия молекул. Симметрия молекулярных систем. Равновесные геометрические конфигурации молекул.	2	2	Понятие о ЛМО и о делокализованных МО. Пути и энергетика хим. реакций. Метод молекулярной механики при анализе строения молекул	4	Вопросы к контрольной работе. Задачи и упражнения	0	5	УК-1	[5], [6], [7], [9], [15]
8	Строение органических соединений, жидкостей, мезофаз, кристаллов.	2	2	Решение задач. Жидкие кристаллы. Модели жидких	4	Вопросы к контрольной работе.	0	5	УК-1	[1], [5], [6], [7], [10], [15]

Положение о разработке и реализации ОПОП СОГУ

				кристаллов.		Задачи и упражнения				
9	Электромагнитные свойства молекул.	2	2	Решение задач с использованием физ. методов исследования	4	Вопросы и задачи к семинарскому занятию.	0	4	УК-1	[1], [2], [3], [4], [5], [14], [18]
	Итоговая контрольная работа			Анализ результатов рубежной работы			0	10		
	<b>Текущая работа студента</b>						<b>0</b>	<b>50</b>		
	<b>Результаты компьютерного тестирования</b>						<b>0</b>	<b>50</b>		
	<b>ИТОГО</b>	<b>18</b>	<b>18</b>		<b>36</b>		<b>0</b>	<b>100</b>		

## 6. Образовательные технологии

Лекции, лекции-беседы, самостоятельная работа студентов.

Используются интерактивные методы обучения: творческие задания, семинары.

№/п.	Тема	Вид занятия	Количество часов	Активные формы	Интерактивные формы
1	Основные положения квантовой механики.	Практическое	2	Моделирование кластеров и блока проблемных вопросов	
2	Квантовая теория образования химических связей	Практическое	2	Перспективно - опережающего обучения, технология, проблемного обучения	Семинар в диалоговом режиме
3	Адиабатическое приближение и понятие поверхностей потенциальной энергии слоя.	Практическое	2	Перспективно - опережающего обучения, технология, проблемного обучения	
4	Расчетные методы квантовой химии: неэмпирические и полумэмпирические.	Практическое	2	Перспективно - опережающего обучения, технология, проблемного обучения	Семинар в диалоговом режиме
5	Химическая связь и строение молекул. Симметрия атомных орбиталей. Гибридизация орбиталей.	Практическое	2	Перспективно - опережающего обучения, технология, проблемного обучения	
6	Сравнение методов ВС и МО.	Практическое	2	Перспективно - опережающего обучения, технология, проблемного обучения	Семинар в диалоговом режиме
7	Геометрия молекул. Симметрия молекулярных систем.	Практическое	2	Перспективно опережающего обучения, технология, проблемного обучения	Семинар в диалоговом режиме
8	Строение органических соединений, жидкостей, мезофаз, кристаллов.	Практическое	2	Перспективно опережающего обучения, технология, проблемного обучения	
9	Электромагнитные свойства молекул.	Практическое	2	Перспективно опережающего обучения, технология, проблемного обучения	



Занятия с применением активных методов обучения составляют 85%, что соответствует требованиям (ФГОС.3++) по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) Профили Химия, Биология.

### **7. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы**

Самостоятельная работа студентов включает выполнение домашних заданий к каждому практическому занятию. Задания содержат как письменные вопросы и задачи, так и устную подготовку по теоретическим вопросам, в зависимости от тематики занятия. Для подготовки к занятиям студенты пользуются учебниками и учебными пособиями, указанными в списке рекомендованной литературы, а также интернет-источниками. Все методические материалы представлены в системе дистанционного обучения СОГУ.

### **8. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, рубежной аттестации и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

Текущий контроль знаний проводится путем оценки выполнения письменных заданий к практическим занятиям, а также устных ответов на практических занятиях.

**Формы работы:** лекции, семинары, контрольные работы, самостоятельные работы (чтение литературы, работа в библиотеке, рефераты, презентации, дискуссии).

**Виды контроля:** текущий (на семинарских занятиях), промежуточный (модульное тестирование), итоговый (зачет во 7 семестре).

Проверка качества усвоения знаний осуществляется не только в устной, но и в письменной форме. Проведение разных по форме и по объему устных и письменных работ дисциплинирует студента, даёт преподавателю основания для объективной оценки знаний каждого студента при выведении суммарного балла, позволяет студенту представить уровень собственных знаний по предмету, увидеть свои сильные и слабые стороны, чтобы учесть их при подготовке к зачету.

Виды текущего контроля:

- а) устный фронтальный или индивидуальный опрос;
- б) письменная самостоятельная работа;
- в) устное изложение содержания прочитанного в рамках самостоятельной работы;
- г) устное выступление по теме обсуждения.

Промежуточный контроль

Дисциплина разбита на модули, которые представляют собой логически завершённые части рабочей программы курса и являются тем комплексом знаний и умений, которые подлежат контролю. Контроль освоения модулей включает в себя выполнение письменных контрольных работ, предусмотренных рабочей программой дисциплины.

В конце семестра проводится контрольное мероприятие, включающее контроль последнего модуля для всех студентов и контроль, который проходят обязательно те студенты, которые имеют задолженность по прошлым модулям, а также те, кто желает улучшить свой рейтинг

Промежуточный контроль осуществляется по балльно-рейтинговой системе.

### **Методика формирования результирующей оценки.**

Итоговая оценка складывается как средневзвешенная по результатам всех оцениваемых работ на протяжении семестра, куда входят посещение лекций и семинаров, ответы и дополнения на семинарах, контрольные работы (контрольные срезы по итогам модуля),

дополнительные оценки по рефератам в сумме с итоговыми результатами бально-рейтингового тестирования.

## **Типовые задания для практических (семинарских) занятий**

### **Раздел 1 «Основные положения квантовой механики»**

#### **Тема 1 «Классическая теория строения вещества»**

**Занятие 1** Основные понятия квантовой химии. Особенности движения частиц и способы описания их состояния. Волновая функция.

##### **План**

1. Особенности движения частиц и способы описания их состояния.
2. Волновая функция.
3. Волновой пакет
4. Постулаты Бора
5. Скорость движения частиц
6. Теория строения веществ.
7. Расчет молекул по аддитивности.
8. Ядерная модель строения атома.
9. Электронное строение атома.
10. Квантовые числа.

##### **Литература:**

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил., табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.

### **Раздел 2 «Квантовая теория образования химических связей»**

#### **Тема 1 «Виды волновых функций атома водорода. Гибридизация»**

**Занятие 1.** Гистограммы. Гибридизация.

##### **План:**

Изображение волновой функции в пространстве в виде гистограммы.

Виды волновых функций.

Гибридизация.

**Методические указания:** При подготовке на вопросы №1-3 изучите материал из литературного источника № 2 С. 29-32.

При подготовке к вопросам №2,3 зарисуйте схемы, выпишите общие определения и формулы в словарь.

##### **Литература:**

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил., табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.

2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – Москва: Издательство Юрайт, 2018. – 233 с. – (Бакалавр. Академический курс). – ISBN 978-5-9916-9385-1. – Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – Москва: Издательство Юрайт, 2018. – 283 с. – (Бакалавр. Академический курс). – ISBN 978-5-9916-9390-5. – Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. – М.: Высш. школа, 1979. – 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.
6. Ахметов, Н.С. Общая и неорганическая химия. учеб. для вузов / Н.С. Ахметов. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва: Высшая школа, 1998. – 743с.

## Тема 2. «Строение молекул»

### Занятие1. Планетарная модель молекулы водорода.

#### План:

Планетарная модель молекулы водорода.

Уравнение Шредингера для модели молекулы водорода.

Карты значений функций на плоскости.

Потенциальная функция системы, состоящая из ядер и электронов.

#### Литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил.,табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – Москва: Издательство Юрайт, 2018. – 233 с. – (Бакалавр. Академический курс). – ISBN 978-5-9916-9385-1. – Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. – 2-е изд., испр. и доп. – Москва: Издательство Юрайт, 2018. – 283 с. – (Бакалавр. Академический курс). – ISBN 978-5-9916-9390-5. – Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. – М.: Высш. школа, 1979. – 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.

## Раздел 3. «Адиабатическое приближение и понятие поверхностях потенциальной энергии слоя»

### Тема 1. «Адиабатическое приближение и понятие поверхностях потенциальной энергии слоя»

#### Занятие1. Адиабатическое приближение и уравнение Шредингера для многоатомных систем.

#### План:

1. Уравнение Шредингера в первом приближении
2. Уравнение Шредингера во втором приближении
3. Уравнение Шредингера в третьем приближении

#### Литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил.,табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

Положение о разработке и реализации ОПОП СОГУ

- высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
  4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>
  5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.

#### **Раздел 4. «Расчетные методы квантовой химии: неэмпирические и полуэмпирические»**

##### **Тема 1. «Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета молекул»**

##### **Занятие 1. Расчетные методы квантовой химии: неэмпирические и полуэмпирические**

###### **План:**

1. Приближенные выражения для матричных элементов оператора Хартри-Фока.
2. Возможность построения полуэмпирической теории электронных оболочек.
3. Метод самосогласования поля.

###### **Литература:**

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил., табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.

#### **Раздел 5. «Строение и свойства сопряженных молекул координационных соединений: теория МО и теория полилигандов»**

##### **Тема 1. «Квантово-химические расчеты молекул»**

##### **Занятие 1. Квантово химические расчеты молекул.**

###### **План:**

1. Квантово-химические расчеты органических соединений по методу Хюккеля.
2. Теория возмущений.
3. Теория МО и теория полилигандов

###### **Литература:**

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил., табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр.

- Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>
  5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.

## **Тема 2. «Сравнение методов ВС и МО»**

### **Занятие 1. Сравнение методов ВС и МО.**

#### **План:**

1. Молекулярный ион водорода.
2. Молекула водорода.
3. Принцип максимального перекрытия.
4. Связывающие и разрыхляющие МО.
5. Симметрия МО
6. Схемы МО.

#### **Литература:**

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. — Томск: Эль Контент, 2010. — 112 с. : ил., табл., схем. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. — ISBN 978-5-4332-0046-3. — Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. — ISBN 978-5-9275-0852-5. — Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.
6. Ахметов, Н.С. Общая и неорганическая химия. учеб. для вузов / Н.С. Ахметов. — 3-е изд., перераб. и доп. — Москва: Высшая школа, 1998. — 743с.

## **Раздел 6. «Квантовая теория химических реакций»**

### **Тема 1. «Поверхности реакций и их свойства»**

#### **Занятие 1. Квантовая теория химических реакций.**

1. Поверхности реакций и их свойства.
2. Квантовая теория химических реакций.
3. Траектории химических реакций.
4. Изображение хода химических реакций.
5. Этапы изменения энергии реагентов продуктов.

#### **Литература:**

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. — Томск: Эль Контент, 2010. — 112 с. : ил., табл., схем. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. — ISBN 978-5-4332-0046-3. — Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. — ISBN 978-5-9275-0852-5. — Текст: электронный.



3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. **Часть 1:** учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. **Часть 2:** учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.
6. Ахметов, Н.С. Общая и неорганическая химия. учеб. для вузов / Н.С. Ахметов. — 3-е изд., перераб. и доп. — Москва: Высшая школа, 1998. - 743с.

## Тема 2. «Термодинамические параметры химических реакций»

### Занятие 1. Термодинамические параметры химических реакций.

#### План:

1. Теплота реакции.
2. Изодесмические реакции.
3. Конфигурационное взаимодействие.

#### Литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. — Томск: Эль Контент, 2010. — 112 с. : ил., табл., схем. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. — ISBN 978-5-4332-0046-3. — Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». — Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. — 100 с. — Режим доступа: по подписке. — URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. — ISBN 978-5-9275-0852-5. — Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. **Часть 1:** учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. **Часть 2:** учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.
6. Ахметов, Н.С. Общая и неорганическая химия. учеб. для вузов / Н.С. Ахметов. — 3-е изд., перераб. и доп. — Москва: Высшая школа, 1998. - 743с.

#### Темы лабораторных работ (не предусмотрены учебным планом ОП).

#### Примерная тематика курсовых работ (не предусмотрены учебным планом ОП).

#### Перечень контрольных вопросов к зачету

1. Основные понятия квантовой химии.
2. Области применения и назначение квантовой химии.
3. Ядерная модель строения атома. Квантовые числа. Электронное строение атома.
4. Энергия ионизации и сродство к электрону.
5. Классическая теория химического строения вещества.
6. Основные положения и выводы теории Бутлерова. Аддитивные схемы, инкременты.
7. Особенности движения частиц и способы описания их состояния.
8. Постулаты Бора. Гипотеза Ле де Бройля.
9. Волновая функция. Волновой пакет
10. Элементы квантовой механики.
11. Одномерный потенциальный ящик. Частица на окружности. Частица в прямоугольной трубке.
12. Закономерности состояний атома водорода. Потенциальная яма виде воронки.

13. Вырождение. Волновые функции атома водорода.
14. Каков смысл терминов "конфигурация" и "конформация" молекул? Поясните, что собой представляют конформации молекул и приведите примеры молекул с конформационной изомерией.
15. Какие типы изомерии химических соединений Вы знаете? Приведите примеры различной изомерии химических соединений.
16. Гибридизация. Вид sp-гибридных орбиталей.
17. Гармонический осциллятор. Оператор Гамильтона для гармонического осциллятора. Волновая функция и энергетические уровни гармонического осциллятора.
18. Строение молекул Планетарная модель молекулы водорода. Уравнение Шредингера для молекулы водорода.
20. Гистограммы карт значений функций для молекулы водорода, фторида лития.
21. Методы валентных схем и молекулярных орбиталей.
22. Силы в молекулах и химическая связь.
23. Теорема Гельмана-Фейнмана. Образование химической связи при распределении валентного электронного облака для случая ковалентной связи (молекула азота); ионной связи (фторид лития).
24. Распределение электронной плотности в молекулах бензола, сэндвичивых структурах, фуллеренах.
25. Каковы основные составляющие и основные типы межмолекулярных взаимодействий? Приведите примеры.
26. Сравните строение молекул простых и координационных неорганических соединений. В чём их сходство и отличие?
27. Что означает термин "полиэдр"? В чём заключаются структурные особенности полиэдров? Приведите примеры.
28. Какие соединения называются клатратами? Какова их возможная структура?
29. Что такое ротаксаны и катенаны? Каково их строение?
30. Что Вы знаете о фуллеренах? В чём особенности их строения?
31. Что Вы знаете о структуре жидкостей? Какова структура ассоциатов воды?
32. Чем отличается структура растворов от структуры простых жидкостей?
33. Какие молекулы склонны к образованию жидкокристаллических фаз?
34. Каковы основные типы кристаллических решёток?

### Темы презентаций

1. История развития представлений о строении атома.
2. Координационная химическая связь.
3. Радиоактивные реакции.
4. Гибридизация.
5. Метод МО и ВС в квантовой химии.
6. Гармонический осциллятор. Бозоны, фермионы.
7. Типы электронных переходов.
8. Поверхности реакций и их свойства.
9. Квантовая теория химических реакций.
10. Траектории химических реакций.
11. Изображение хода химических реакций.
12. Этапы изменения энергии реагентов продуктов.

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

**Раздел №1 Основные положения квантовой химии**

1. Квантовая химия изучает:

- а. Качественный и количественный анализ веществ
- б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой.
- в. Химические процессы на основе физических законов.
- г. Поверхностные явления на разделе фаз.
- д. Строение вещества на основе математики и других наук.

2. В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование

- а. Всевозможных связей между атомами
- б. Парных связей между атомами
- в. «Связанных» и «несвязанных» атомов

3. Теория строения вещества объясняет, что

- а. Все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»);
- б. Часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми;
- в. Невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

4. В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как

- а. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей;
- б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов;

5. Синхотронное излучение имеет природу

- а. светового луча
- б. электрического поля
- в. электромагнитного поля;

6. Постулаты Бора характеризуют атом в

- а. неустойчивом состоянии
- б. переходном состоянии;
- в. стационарном состоянии;

7. Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен

- а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства;
- б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства;

8. Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое.

- а.  $E_2 h \omega = E_1 + E_2$
- б.  $h \omega = E_1 -$
- в.  $h / \omega = E_1 - E_2$



9. Волновая функция характеризуется

- а. как комплексная величина;
- б. как величина не зависящая от времени;
- в. как величина, обладающая свойством дискретности; 49

10. Уравнение  $\int |\psi|^2 dV$  означает, что

- а. частица располагается только в области определенного пространства;
- б. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства;
- в. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 1;
- г. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 0;

## Контрольная работа

### Раздел 2 «Квантовая теория образования химических связей»

Вариант 1.

- 1. В чем заключается смысл теоремы Гельмана – Фейнмана?
- 2. В чем проявляется связь между классическим и квантовым представлением о характере взаимодействия между отдельными частицами в многоатомной молекуле?
- 3. Чем определяются силы, действующие на ядра атомов?
- 4. Как с помощью общих представлений о силах, действующих на ядра молекулы со стороны электронной оболочки, можно объяснить существование невалентных химических структур, подобных сэндвичевым и объемным молекулам?

Вариант 2.

- 1. Что такое химическая связь? Какова природа этой связи?
- 2. Какую роль играют в тех или иных случаях так называемые  $\sigma$ - и  $\pi$ - составляющие общего электронного распределения?
- 3. Какие физические явления полностью теряются, если ограничиться решением задачи о движении электронов в поле неподвижных ядер?
- 4. Как можно объяснить химическую связь в молекулах фуллеренов?

Вариант 3.

- 1. Какое условие необходимо наложить с самого начала на возможные движения ядер при решении общей электронно-колебательной задачи для многоатомных молекул?
- 2. Что такое вычисляемые и измеряемые величины при исследовании микромира?
- 3. Какой физический смысл придается понятию заряда атома по Малликену?
- 4. Есть ли различия в характере химических связей в плоских циклических ароматических структурах типа бензола, нафталина и сферических структурах, где казалось бы имеются те же самые кольца, на расположенные на поверхностях сферы?

Вариант 4.

- 1. Какие вы знаете механизмы влияния заместителей на реакционную способность молекул?
- 2. Почему особую роль играют полярные заместители?
- 3. Имеется ли удаленное влияние полярных заместителей и каков физический смысл их действия?
- 4. Как можно определить характер химической связи и действие электронно-ядерных сил с помощью исследования карт проекций отдельных составляющих электронно-ядерных сил вдоль заданных сечений?

**Тестовые задания для текущего контроля знаний по дисциплине**

## **Раздел 1. «Основные положения квантовой химии».**

## **Раздел 2. «Квантовая теория образования химических связей»**

1. Квантовая химия изучает:

- а. Качественный и количественный анализ веществ
- б. Взаимное превращение одного вида энергии в другой.
- в. Химические процессы на основе физических законов.
- г. Поверхностные явления на разделе фаз.
- д. Строение вещества на основе математики и других наук.

2. В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование

- а. Всевозможных связей между атомами
- б. Парных связей между атомами
- в. «Связанных» и «несвязанных» атомов

3. Теория строения вещества объясняет, что

- а. Все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»);
- б. Часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми;
- в. Невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

4. В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как

- А. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей;
- Б. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов;

5. Синхротронное излучение имеет природу

- а. светового луча
- б. электрического поля
- в. электромагнитного поля;

6. Постулаты Бора характеризуют атом в

- а. неустойчивом состоянии
- б. переходном состоянии;
- в. стационарном состоянии;

7. Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен

- а. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства;
- б. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства;

8. Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое.

- а.  $E_2 h \omega = E_1 + E_2$
- б.  $h \omega = E_1 -$
- в.  $h / \omega = E_1 - E_2$

9. Волновая функция характеризуется

- а. как комплексная величина;

- б. как величина не зависящая от времени;
- в. как величина, обладающая свойством дискретности;

10. Уравнение  $\int |\psi|^2 dV$  означает, что

- а. частица располагается только в области определенного пространства;
- б. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства; 51
- в. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 1;
- г. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 0;

11. Выберите уравнение, которое означает, что волновая функция это сопряженная функция.

- а.  $\psi(x,y,z)^2$
- б.  $\psi = \psi(x,y,z,t)$
- в.  $[\psi^2] = \psi\psi^*$
- г.  $\int |\psi|^2 dV$

12. Возникновение волнового пакета

- а. не зависит от изменения величины волновой функции.
- б. зависит от резкого понижения волновой функции
- в. зависит от резкого возрастания волновой функции;

### Тестовые задания для итогового контроля знаний по дисциплине

1) Изотопы одного элемента отличаются числом...

- а. электронов;
- б. нейтронов;
- с. протонов;
- д. позитронов.

2) Радиус атомов уменьшается в ряду элементов...

- а. Br, F, Cl;
- б. Li, Na, K;
- с. P, Si, Al;
- д. Se, S, O.

3) Радиус элементов возрастает в ряду...

- а. O, S, Te, Se;
- б. Mg, Ca, Ba, Sr;
- с. Si, Ge, Sn, Pb;
- д. Al, Si, Mg, Na.

4) В периоде с увеличением порядкового номера элементов металлические свойства...

- а. усиливаются;
- б. ослабевают;
- с. изменяются неоднозначно;
- д. не изменяются.

5) В группах с увеличением порядкового номера электроотрицательность элементов...

- а. не изменяется;
- б. увеличивается;
- с. уменьшается;

d. изменяется периодически.

6) Кислотный характер имеют оксиды, образованные металлами...

- a. главных подгрупп;
- b. со степенью окисления равной или выше +4;
- c. с любой степенью окисления;
- d. со степенью окисления ниже +4.

7) Уравнение Шредингера показывает характеристику волновой функции

- a. относительно декартовых координат;
- b. относительно времени;
- c. относительно изменения теплового эффекта;
- d. относительно перехода частицы из одного состояния в другое.

8) В теории химического строения вещества коллективное взаимодействие можно рассматривать как образование:

- a. всевозможных связей между атомами;
- b. парных связей между атомами;
- c. «связанных» и «несвязанных» атомов.

9) Уравнение Шредингера показывает характеристику

- a. атома в пространстве;
- b. поведение электрона внутри атома;
- c. протекание химической реакции.

10) Теория строения вещества объясняет, что

- a. все взаимодействия между атомами являются главными («сильными»);
- b. часть взаимодействий между атомами являются главными («сильными»), часть взаимодействий между атомами слабыми;
- c. невозможно определить наличие главных и слабых связей между атомами.

11) Волновая функция характеризуется

- a. как комплексная величина;
- b. как величина не зависящая от времени;
- c. как величина, обладающая свойством дискретности.

12) Операторы это величины, которые

- a. зависят от функций системы;
- b. не зависят от функций системы.

13) Квантовая химия изучает:

- a. Качественный и количественный анализ веществ.
- b. Взаимное превращение одного вида энергии в другой.
- c. Химические процессы на основе физических законов.
- d. Поверхностные явления на разделе фаз.
- e. Строение вещества на основе математики и других

14) Выберите уравнение, которое означает, что волновая функция это сопряженная функция.

- a.  $\psi(x,y,z)^2$

- b.  $\psi = \psi(x, y, z, t)$
- c.  $[\psi^2] = \psi \psi^*$
- d.  $\int |\psi^2| dV$

15) В теории строения вещества представлена взаимосвязь между строением вещества и его свойствами как

- a. функция парциальных свойств только эффективных атомов и химических связей;
- b. функция парциальных свойств химических связей и пар несвязанных атомов.

16) Уравнение:  $H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2]$  выражает

- a. оператор импульса;
- b. оператор Гамильтона;
- c. оператор энергии.

17) Потенциальный одномерный ящик показывает

- a. уровни энергии;
- b. распределение электронов по уровням;
- c. характеристику волновых функций.

18) Синхротронное излучение имеет природу

- a. светового луча ;
- b. электрического поля;
- c. электромагнитного поля;

19) вырождением называют

- a. набор главных квантовых чисел, которому соответствует одинаковая энергия;
- b. набор магнитных квантовых чисел, которому соответствует одинаковая энергия;
- c. набор главных квантовых чисел, которому не соответствует одинаковая энергия;
- d. набор магнитных квантовых чисел, которому не соответствует одинаковая энергия.

20) Постулаты Бора характеризуют атом в ....

- a. неустойчивом состоянии
- b. переходном состоянии;
- c. стационарном состоянии.

21) Гистограмма показывает распределение....

- a. электронной плотности;
- b. распределение энергии связи;
- c. распределение энергии связи.

22) Выберите формулу, которая характеризует монохроматическое излучение атома при переходе из одного стационарного состояния в другое.

- a.  $E_2 h \omega = E_1 + E_2$
- b.  $h \omega = E_1 -$
- c.  $h / \omega = E_1 - E_2$

23) Волновая функция гибридных облаков является

- a. Нормированной;
- b. Ортогональной;

- с. Линейной;
- d. Дискретной.

24) Уравнение  $\int |\psi|^2 dV$  означает, что

- a. частица располагается только в области определенного пространства;
- b. частица может находиться во всякой точке внутри и вне пространства;
- с. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 1;
- d. интеграл взятый для частица на границе пространства равен 0.

25) Гипотеза Ле де Бройля объясняет, что электрон способен

- a. дифрагировать подобно волнам сохраняя свои свойства;
- b. дифрагировать подобно волнам не сохраняя свои свойства.

26) Возникновение волнового пакета

- a. не зависит от изменения величины волновой функции.
- b. зависит от резкого понижения волновой функции
- в. зависит от резкого возрастания волновой функции.

### **Вопросы, выносимые на самостоятельное обучение**

#### **Раздел 1 «Основные положения квантовой химии»**

1. Квантовые числа электронов в атоме: главное квантовое число, орбитальное квантовое число, магнитное квантовое число, спиновое квантовое число.
2. Электронное строение атома. Принцип Паули, правило Хунда, принцип наименьшей энергии.
3. Особенности движения электронов в атоме.

#### **Раздел 2 «Квантовая теория образования химических связей»**

1. Виды и основные свойства химической связи.
2. Координационная связь
3. Основы спектроскопии как основного метода определения строения и структуры молекул
4. Основы рефракции как основного метода определения строения и структуры молекул

#### **Раздел 3 «Адиабатическое приближение и понятие о поверхностях потенциальной энергии слоя»**

1. Понятия о потенциальной и кинетической энергии.
2. Понятие о поверхностях потенциальной энергии слоя.
3. Основные приближения при решении волнового уравнения.

#### **Раздел 4 «Расчетные методы квантовой химии»**

1. Валентность.
2. Валентные электроны.
3. Атом в возбужденном состоянии.
4.  $\pi$ - и  $\sigma$ -связи.

#### **Раздел 5 «Строение и свойства сопряженных молекул координационных соединений: теория МО и теория полилигандов»**

1. Уровни энергии для двухатомных молекул (МО).
2. Схемы ВС.

## Раздел 6 «Квантовая теория химических реакций»

1. Элементарные акты химических взаимодействий.
2. Энергия активации.
3. Энергия образования связи.
4. Энергия разрыва связи.
5. Виды электронных облаков в различных квантовых состояниях.

## 9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

### Литература а) основная литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. – Томск: Эль Контент, 2010. – 112 с. : ил.,табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>. – ISBN 978-5-4332-0046-3. – Текст: электронный.
2. Норанович, Д.А. Основы квантово-механических представлений о строении атома / Д.А. Норанович; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет». – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2011. – 100 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241141>. – ISBN 978-5-9275-0852-5. – Текст: электронный.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 1*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 233 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9385-1. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422365>.
4. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. *Часть 2*: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2018. — 283 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-9390-5. — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/422395>
5. Лупейко, Т.Г. Введение в общую химию / Т.Г. Лупейко; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет», Химический факультет. – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2010. – 232 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241121>. – ISBN 978-5-9275-0763-4. – Текст: электронный.
6. Крашенинин, В.И. Симметрия в химии / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. – 80 с. – Режим доступа: по

- подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232679>. – ISBN 978-5-8353-1321-1. – Текст: электронный.
7. Крашенинин, В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>. – ISBN 978-5-8353-1298-6. – Текст: электронный.
  8. Майер И., Избранные главы квантовой химии / И. Майер - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 387 с. - ISBN 978-5-00101-501-7 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015017.html>  
Цирельсон В.Г., Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). - М.: БИНОМ, 2014. - 522 с. - ISBN 978-5-9963-2362-3 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623.html>
  9. Цирельсон В.Г., Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд., испр. (эл.). - М. : БИНОМ, 2014. - 522 с. - ISBN 978-5-9963-2362-3 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323623.html>
  10. Биоорганическая химия: учебное пособие для вузов / Н. Н. Мочульская, Н. Е. Максимова, В. В. Емельянов; под научной редакцией В. Н. Чарушина. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва: Издательство Юрайт, 2019; Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та. — 108 с. — (Университеты России). — ISBN 978-5-534-08085-8 (Издательство Юрайт). — ISBN 978-5-7996-1920-6 (Изд-во Урал. ун-та). — Текст: электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. — URL: <https://www.biblio-online.ru/bcode/438170>.
  11. Журнал структурной химии / под ред. Л.Н. Мазалов - Новосибирск: Издательство СО РАН, 2012. - Т. 52, № 6. - 215 с. - ISSN 0136-7463; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=130606>.

#### **б) дополнительная литература**

12. Стромберг, А.Г. Физическая химия: учеб. для хим. спец. вузов/ А.Г. Стромберга.- 3-е изд. испр. и доп. - Москва: Высшая школа, 2002.- 527с. URL: <http://library.psu.kz/fulltext/buuk/b661.pdf>
13. Ахметов, Н.С. Общая и неорганическая химия. учеб. для вузов / Н.С. Ахметов. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва: Высшая школа, 1998. - 743с.
14. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (электронные оболочки): Учеб. пособие для ун-тов. - М.: Высш. школа, 1979. - 407 с. URL: <https://alleng.org/d/chem/chem93.htm>.
15. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие. 2-е изд. М.: Высш. шк., 1984. - 275 с. URL: <https://elib.pstu.ru/vufind/Record/RUPSTUbooks139198>.



16. Татевский, В.М. Квантовая механика и теория строения молекул / В.М. Татевский. – Москва: Издательство МГУ, 1965. – 166 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=475632>. – Текст: электронный.
17. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Строение вещества. Учеб. пособие для вузов. Изд. 3-е перераб. и доп. - М.: Высш. шк., 1978. URL: <http://sportzagolovki.ru/stroenie-veshchestva/>
18. Боровик Е.С., Лекции по магнетизму / Боровик Е. С., Еременко В. В., Мильнер А. С. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. - 512 с. - ISBN 5-9221-0577-9 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5922105779.html>
19. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Учебное пособие для студентов хим. фак-тов ун-тов, химико-технол. ин-тов, аспирантов и преподавателей / Серия "Учебники и учебные пособия". - Ростов-на-Дону: "Феникс", 1997. URL: <http://med-books.by/chimiya/page/20/>
20. Строение вещества. Методические указания для студентов. / Н.И. Люткин. - Владикавказ: Изд-во СОГУ, 1995.
21. Журнал структурной химии / под ред. Л.Н. Мазалов - Новосибирск : Издательство СО РАН, 2012. - Т. 52, № 6. - 215 с. - ISSN 0136-7463; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=130606>
22. Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии // Соросовский образовательный журнал. 1996. №5. С. 35 - 40.
23. Витковская Н.М. Метод молекулярных орбиталей: основные идеи и важные следствия // Соросовский образовательный журнал. 1996. №6. С. 58 - 64.
24. Гиричев Г.В. Структура молекул солей кислородсодержащих кислот // Соросовский образовательный журнал. 1999. №11. С.40 - 44.
25. Дядин Ю.А. Супрамолекулярная химия: клатратные соединения // Соросовский образовательный журнал. 1998. №2. С. 79 - 88.
26. Немухин А.В. Компьютерное моделирование в химии // Соросовский образовательный журнал. 1998. №6. С. 48 - 52.
27. Степанов Н.Ф. Потенциальные поверхности в химических реакциях // Соросовский образовательный журнал. 1996. №10. С. 33 - 41.
28. Степанов Н.Ф. Сложный мир элементарных актов химических реакций // Соросовский образовательный журнал. 1996. №11. С. 30 - 36.
29. Степанов Н.Ф. Химическая связь в простых двухатомных молекулах // Соросовский образовательный журнал. 1998. №10. С. 37 - 43.

**в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:**

Обеспечен доступ к современным профессиональным базам данных, информационным справочным и поисковым системам (библиотека СОГУ):

- **Электронная библиотека диссертаций и авторефератов РГБ** (ЭБД РГБ)  
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **ЭБС «Университетская библиотека ONLINE»**  
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **ЭБС «Научная электронная библиотека eLibrary.ru»**  
Самостоятельная регистрация на сайте
- **ЭБС «Консультант студента» Студенческая электронная библиотека по медицинскому и фармацевтическому образованию, а также по естественным и точным наукам в целом**  
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **ЭБС «Юрайт» — образовательная среда, включающая виртуальный читальный зал учебников и учебных пособий от авторов из ведущих вузов России по всем направлениям и специальностям**  
Требуется регистрация в библиотеке СОГУ
- **Springer Customer Service Center GmbH** (база данных, содержащие электронные издания издательства Springer Nature за период 2011 — 2017 гг. (полнотекстовая коллекция в количестве 46 332 книг)

Сайт дистанционного обучения СОГУ <http://dist-edu.nosu.ru/>

**Электронные ресурсы, обеспечивающие реализацию образовательных программ  
ФГБОУ ВО «Северо-Осетинский государственный университет имени Коста Левановича Хетагурова»**

<b>№ №</b>	<b>Наименование Электронного ресурса</b>	<b>Принад лежн ость</b>	<b>Адрес сайта</b>	<b>Сведения о право обладателе</b>	<b>№ договора на право использования ЭБС</b>	<b>Срок действия заключенного договора</b>	<b>Кол-во точек доступа/ пользователей</b>	<b>Характерист ика доступа</b>
1	<b>ЭБС "Университетская библиотека Online"</b>	Сторонняя	<a href="http://www.biblioclub.ru">http://www.biblioclub.ru</a>	ООО «Некс- Медиа»	Договор № 135-06/14 от 12.09.2014 г.	12.09.2014 г.-11.09.2015 г.	7000	По IP-адресу безлимитный
					Договор № 167-08/15 от 12.09.2015 г.	12.09.2015 г.-11.03.2016 г.	7000	
					Договор № 58-02/16 от 09.03.2016 г.	12.03.2016 г.-11.09.2016 г.	7000	
					Договор № 202-08/16 от 24.08.2016 г.	12.09.2016 г.-11.03.2017 г.	7000	
					Договор № 069-02/17 от 13.03.2017	12.03.2017 г.-11.03.2018 г.	7000	
					Договор № 184-08/17 от 04.09.2017	12.09.2017-11.02.03.2018.	7000	
					Договор № 056-02/18 от 25.05.2018	16.04.2018 г.- 16.10.2018 г.	7000	
					Договор № 163-10/18 от 30.10.2018	17.10.2018 г.-31.12.2018 г.	7000	
					Договор № 21-02/2019 от 14.02.2019	01.01.2019 г.- 30.06.2019 г.	7000	
					Договор № 75-06/19 от 08.07.2019	01.07.2019 г.-31.12.2019 г.	7000	

### Рекомендуемые интернет-адреса по химии:

1. Weisberg M., Needham P., Hendry R. Philosophy of Chemistry (First published Mar 14, 2011) // The Stanford Encyclopedia of Philosophy. Edited by Edward N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/entries/chemistry/>
2. HYLE. International Journal for Philosophy of Chemistry. <http://www.hyle.org/journal/concept.htm>

### Базы данных:

1. Scopus <https://www.scopus.com/>
2. Web of Science <https://clarivate.com/webofsciencegroup/solutions/web-of-science/>

### Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, необходимого для освоения дисциплины:

пакет *Microsoft Office* (*Microsoft Office Word, Microsoft Office PowerPoint*), *Adobe Reader, WinDjView*, программное обеспечение для редактирования химических формул *IsisDraw* (см. список ниже).

### Реестр программного обеспечения СОГУ 2019

№ п/п	Наименование	№ договора(лицензия)
1.	Windows 10 Enterprise	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
2.	Windows 10 Pro for Workstations	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
3.	Windows 8.1 Enterprise	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
4.	Windows 8.1 Professional	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
5.	Windows 8 Enterprise	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
6.	Windows 8 Professional	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
7.	Windows 7 Enterprise	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
8.	Windows 7 Professional	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
9.	Office Standard 2016	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
10.	Office Standard 2013	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
11.	Office Standard 2010	№ 4100072800 Microsoft Products (MPSA) от 04.2016г
12.	Система тестирования Sunrav WEB Class	№468 от 03.12.2013 ИП Сунгатулин Р.Т.(бессрочно)
13.	Программное обеспечение 1С:Предприятие. Бухгалтерский Учет. Типовая конфигурация 8 сетевая версия	№ СД/108 от 29.08.2017 (максимум-софт) бессрочно
14.	Система компьютерной верстки MikTex	Лицензия FSF/Debian (Свободное программное обеспечение) бессрочно
15.	Антивирусное программное обеспечение Kasperksy Total Security	№17Е0-180222-130819-587-185 от 26.02. 2018 до 14.03.2019г
16.	Система управления базами данных MySQL FireBird	Свободное программное обеспечение(бессрочно)
17.	Интегрированная среда разработки Eclipse	Свободное программное обеспечение(бессрочно)
18.	Программное обеспечение для редактирования химических формул Isis Draw	Свободное программное обеспечение(бессрочно)
19.	Система поиска текстовых заимствований «Антиплагиат.ВУЗ»	№795 от 26.12.2018 (действителен до 30.12.2019г) с ЗАО «Анти-Плагиат»
20.	Программное обеспечение 1С:	№КП /108 от 29.08.2017 с ООО

	Предприятие 8.3 Управление торговлей	«Максимум»(бессрочно)
21.	Программное обеспечение 1С:зарплата и кадры гос.учреждения8	№СД/93 22.08.2017г. «МАКСИМУМ-СОФТ» бессрочно
22.	Программное обеспечение 1С:бюджет.	№СД/76 01.03.2017г. «максимум-софт» бессрочно
23.	Офисная система Libre Office	Лицензия GNU/GPL свободное программное обеспечение (бессрочно)
24.	Автоматизированная система «Управление –Деканат БРС»	Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015611830 от 06.02.2015(бессрочно)
25	Программа для ЭВМ «Банк вопросов для контроля знаний»	Разработка СОГУ Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015611829 от 06.02.2015(бессрочно)
26	Консультант+	№430-2017/614 от11.01.2017 ООО "Фаст-Информ"
27	гарант	01.2019-12.2019
28	планы	№5581, от 09.01.2019г. (09.01.2019г. до 08.01.2020г.) ООО ЛММИС
29	VSDESK	№ 108205/01 от 05.02.2018г. ИП И.А.Сергеевич
30	«Галактика»	№31907480031 от 25.02.2018г.(бессрочно)
31	BricsCAD	Bricys NV, 29.11.2018г до 29.11.2019г

## 10. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

В образовательном процессе используется:

- Лекционная аудитория и лаборатория физико-химических методов анализа органических соединений, для проведения лекционных, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная стандартным набором учебной мебели, учебной доской, комплексом мультимедийного презентационного оборудования, современным научно-исследовательским приборным оборудованием;
- компьютерный класс с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета;

### Сведения о наличии оборудованных учебных кабинетов, в том числе приспособленным для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Код	Наименование специальности, направления подготовки	Наименование дисциплины (модуля), практик в соответствии с учебным планом	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Приспособленность помещений для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья
04.03.01	Химия	Органическая химия, Физическая химия, Высокомолекулярные соединения, Химическая экология, Системное моделирование, Строение вещества, Кристаллохимия, Основы квантовой химии,	Лекционная аудитория	Учебных мест – 40 Рабочих мест – 1 Оборудование: - Интерактивное мультимедийное оборудование (Доска FOX IB82, Проектор Aser U5200 наКомпьютеры в комплекте (Монитор (BENQ G2255A<Black>)//Системный блок – 1 шт.	Частично приспособлено

		Теоретические основы квантовой химии, Коллоидная химия, основы научных исследований, Введение в профессию, Введение в специальность			
44.03.05	Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки Химия, Биология)	Общая экология, Органическая химия, Избранные главы органической химии, химия окружающей среды, химические процессы в природе			

**Сведения о наличии объектов для проведения практических занятий, в том числе приспособленным для использования  
инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья**

Код	Наименование специальности, направления подготовки	Наименование дисциплины (модуля), практик в соответствии с учебным планом	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Приспособленность помещений для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

04.03.01	Химия	Физические методы исследования, Строение вещества, Основы квантовой химии, Кристаллохимия, Электрохимия органических соединений, Преддипломная практика	Лаборатория физико-химических методов анализа органических соединений	<p>Учебных мест – 20 Рабочих мест – 10</p> <p>Оборудование: - Мультимедийный проектор с экраном (Мультимедийный проектор OPTOMA projector DX32, с потолочным креплением и наб. кабелей – 1 шт. Компьютер д/комп. класса Pentium 4-506 Foxconn 915 GL7MH-S 512 Mb ОЗУ+/клавиат – 1 шт. Компьютер Pentium 4-506 Foxconn 915 GL7MH-S 512 Mb ОЗУ – 1 шт. Компьютер в комплекте (Монитор (AOC E2250Swnk &lt;Black&gt;)//Системн – 3 шт.</p> <p>Потенциометр ПП-63М -1шт Поляриметр круговой СМ-3 -1шт Потенциостат SP-50 -1шт Спектрофотометр ПЭ 5400 УФ -1шт Термостат Huber CC-K6 – 1шт Хромато-масс-спектрометр Termo Scientific TRACE 1300 ISQ (Thermo Fisher Scientif – 1 шт</p>	Частично приспособлено
44.03.05	Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки Химия, Биология)	Строение молекул и основы квантовой химии			



## **11. Лист обновления/актуализации**

Программа обновлена.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры органической химии  
*наименование кафедры*  
от «28» июня 2019 г., протокол № 11.

Программа одобрена на заседании совета факультета химии, биологии и биотехнологии от  
«01» июля 2019 г., протокол № 12.