

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 11 от «07» июня 2019 г.
Зав. кафедрой Мустафин А.Г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
Г.Г. Гарифуллина /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина
Строение вещества

Обязательная часть

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность).
04.03.01. Химия

Направленность (профиль) подготовки
Аналитическая химия;
Высокомолекулярные соединения;
Органическая и биорганическая химия;
Физическая химия;

Квалификация
бакалавр

Разработчик (составитель)
профессор, д.х.н., доцент

Хайруллина В.Р. / Хайруллина В.Р.
(подпись, Фамилия И.О.)

Для приема: 2019 г.

Уфа 2019 г.

Составитель: Хайруллина В.Р., д.х.н., доцент, профессор кафедры физической химии и химической экологии

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 11 от «017» июня 2019 г.

Заведующий кафедрой



_____ / Мустафин А.Г

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	4
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	4
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	5
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	5
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	6
4.3. Рейтинг-план дисциплины	16
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	16
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	16
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	18
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	19

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Уметь: применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных
		ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Владеть: навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Строение вещества» относится к вариативной части обязательного цикла.

Дисциплина изучается на 3 курсе в 5 и 6 семестрах.

Цель освоения данной дисциплины заключается в формировании базовых знаний в области строения органических, неорганических, а также координационных соединений, расширения общего научного кругозора специалистов в области общей и аналитической химии, знакомства с базовыми теоретическими принципами методов идентификации и установления строения органических и неорганических соединений. Задачи изучения дисциплины «Строение вещества»: 1) усвоение основных понятий теории строения молекул и конденсированного вещества; 2) изучение основных методов спектроскопии.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: «Общая химия», «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Физика (разделы «Оптика», «Атомная и ядерная физика»)».

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции **ОПК-3** Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	Знает отдельные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении, но затрудняется в их реализации	Знает основные приемы работы со специализированными программами, используемыми в химии, материаловедении и смежных с ними областях знания
	Уметь: применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	Умеет использовать отдельные функции некоторых специализированных программ для обработки экспериментальных данных	Умеет использовать специализированное программное обеспечение для проведения теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных при решении задач профессиональной сферы деятельности
ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	Знает отдельные приемы работы с наиболее популярными специализированными программами, используемыми в химии и материаловедении, но затрудняется в их реализации	Знает основные приемы работы со специализированными программами, используемыми в химии, материаловедении и смежных с ними областях знания
	Владеть: навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности	Владеет способностью использовать специализированное программное обеспечение только при непосредственном участии специалиста более высокой квалификации	Владеет способностью самостоятельно использовать специализированные базы данных и специальное программное обеспечение для поиска необходимой научно-технической информации, проведения расчетов, обработки экспериментальных данных, подготовки научных публикаций и докладов

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных Уметь: применять специализированное программное обеспечение при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных	лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; рефераты; доклады; контрольные работы; коллоквиум; комплект разноуровневых задач; круглый стол; тест
ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Знать: основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических	

	<p>расчетов и обработке экспериментальных данных</p> <p>Владеть: навыками применения специализированного программного обеспечения и баз данных при решении задач профессиональной сферы деятельности</p>	
--	--	--

Темы групповых и/или индивидуальных творческих заданий/проектов

1. Закономерности в геометрической конфигурации молекул. Длины связей и валентные углы.
2. Дипольный момент и изомерия молекул.
3. Электронные спектры двухатомных молекул.
4. Поляризуемость молекулы.
5. Спектральные области.
6. Закономерности в углах внутреннего вращения, конформеры.
7. Равновесная геометрическая конфигурация молекулы.
8. Колебательные спектры комбинационного рассеяния.
9. Энергетические состояния двухатомной молекулы.
10. Поляризуемость молекулы.
11. Статистическое распределение молекул по энергетическим состояниям.
12. Отталкивание электронных пар.
13. Интенсивность электронно-колебательных спектров, принцип Франка-Кондона.
14. Поляризация диэлектриков.
15. Равновесная геометрическая конфигурация молекулы.
16. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекул.
17. Координаты атомов (ядер) молекулы.
18. Поляризация диэлектриков.
19. Ангармонический осциллятор.
20. Внутреннее вращение в 1,2-дихлорэтаноле.
21. Электрический дипольный момент в классической теории.
22. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Квантовый подход к КР.
23. Поляризация диэлектрика в переменном поле. Мольная рефракция.
24. Симметрия молекул.
25. Взаимодействие вращений и колебаний.
26. Классическая модель молекулы. Основные понятия.
27. Двухатомная молекула как жесткий ротатор.
28. Вращательные спектры комбинационного рассеяния линейных молекул.
29. Энергетические состояния двухатомной молекулы.
30. Гармонический осциллятор.
31. Межъядерные расстояния, валентные углы, углы внутреннего вращения.
32. Колебательно-вращательные переходы в двухатомной молекуле.

Критерии оценки (в баллах):

1 балл выставляется студенту, если студент правильно ответил на три карточки из пяти;
0 баллов выставляется студенту, если студент неправильно ответил на три карточки из пяти

Лабораторных занятий по курсу «Строение вещества»

Лабораторное занятие 1. Основы классической теории химического строения

Основные положения классической теории химического строения. Молекулярные модели различного уровня в современной теории химического строения.

Величины, определяющие геометрическую конфигурацию молекулы: межъядерные расстояния, валентные углы, двугранные и торсионные углы. Внутреннее вращение. Конформации молекул. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

Лабораторное занятие 2. Симметрия молекул

Элементы и операции симметрии ядерной конфигурации молекулы. Точечные группы симметрии. Понятие о представлениях групп и характерах представлений.

Лабораторное занятие 3. Электрические свойства молекул

Постоянное и переменное внешнее электрическое поле. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Связь электрических свойств молекул с электрическими свойствами вещества. Молярная поляризация и молярная рефракция.

Лабораторное занятие 4. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул.

Статистическое распределение молекул по энергетическим состояниям. Вращение молекул как целого. Различные типы молекулярных волчков.

Лабораторное занятие 5. Колебательные спектры молекул.

Колебания молекул. Приближение гармонического и ангармонического осциллятора. Взаимодействие вращений и колебаний. Нормальные колебания, частоты нормальных колебаний и частоты основных колебательных переходов.

Лабораторное занятие 6. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Микроволновые, ИК- и КР- спектры молекул, Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

Критерии оценки лабораторных работ

«5 баллов»: Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент точно ответил на контрольные вопросы, свободно ориентируется в предложенном решении, может его модифицировать при изменении условия задачи. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

«4 балла»: Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент ответил на теоретические вопросы, испытывая небольшие затруднения. Качество оформления отчета к работе не полностью соответствует требованиям.

«3 балла»: Студент правильно выполнил задание к работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе. Студент не может полностью объяснить полученные результаты.

«2 балла»: Студент неправильно выполнил от 70% до 50% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

«1 балл»: Студент неправильно выполнил свыше 70% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

«0 баллов» Студент не выполнил все задания работы и не может объяснить полученные результаты

Комплект тестов

1. Укажите верное неравенство:

А) $E_e \gg E_v \gg E_j$

в) $E_e \geq E_v \geq E_j$

Б) $E_v \gg E_e \gg E_j$

г) $E_e \leq E_v \gg E_j$

2. Укажите правильную формулу, используемую для расчета полной энергии в квантовой механике

А) $E = E_e + E_v + E_j$

в) $E = E_v + E_j$

Б) $E = E_e + E_v$

г) $E = E_e + E_v - E_j$

3. Выберите правильный ответ:

А) $E_e = 10^5 \div 10^6$ Дж/моль

в) $E_e = 10^6 \div 10^7$ Дж/моль

Б) $E_e = 10^4 \div 10^5$ Дж/моль

г) $E_e = 10^5 \div 10^6$ кДж/моль

4. Выберите верное неравенство:

А) $\omega_e \gg \omega_e x_e > 0$

В) $\omega_e < \omega_e x_e < 0$

Б) $\omega_e \ll \omega_e x_e > 0$

Г) $\omega_e \gg \omega_e x_e < 0$

5. Укажите правильное значение энергии при переходе двухатомной молекулы между разрешенными правилами отбора колебательными уровнями:

А) $E_v = 10^4$ Дж/моль

В) $E_v = 10^5$ Дж/моль

Б) $E_v = 10^3$ Дж/моль

Г) $E_v = 10^2$ Дж/моль

6. Укажите правильное значение энергии при переходе двухатомной молекулы между разрешенными правилами отбора вращательными уровнями:

А) $E_J \sim 10^2$ Дж/моль

В) $E_J = 10^2$ ккал/моль

Б) $E_J \sim 10^2$ кДж/моль

Г) $E_J = 10^2$ кал/моль

7. Выберите правильный ответ:

А) * каждое электронное состояние двухатомной молекулы имеет свой набор сходящихся колебательных и расходящихся вращательных состояний;

Б) каждое электронное строение двухатомной молекулы имеет свой набор расходящихся колебательных и вращательных состояний;

В) каждое электронное состояние двухатомной молекулы имеет свой набор сходящихся колебательных и вращательных состояний;

Г) каждое электронное состояние двухатомной молекулы имеет свой набор расходящихся колебательных и сходящихся вращательных состояний

8. Выберите верное соотношение для расчета частоты колебаний двухатомной молекулы ν'

А) $\nu' = \frac{1}{\lambda}$

В) $\nu' = 2\pi\lambda$

Б) * $\nu' = \frac{c}{\lambda}$

Г) $\nu' = \frac{\lambda}{c}$

9. Выберите верное соотношение для пересчета между волнового числа ν в частоту колебаний ν' для двухатомной молекулы

А) * $\nu' = c\nu$

В) $\nu' = \frac{\nu}{c}$

Б) $\nu' = \frac{c}{\nu}$

Г) $\nu' = \frac{\nu'}{2\pi}$

10. Укажите правильную формулу для расчета терма двухатомной молекулы:

А) * $\epsilon = \frac{E}{hc}$

В) $\epsilon = \frac{E}{hc\lambda}$

Б) $\epsilon = \frac{hc}{\lambda}$

Г) $\epsilon = \frac{hc\lambda}{E}$

11. Укажите правильную формулу для расчета момента инерции двухатомной молекулы АВ

А) $I = \frac{\text{молекулярная масса}_A \cdot \text{молекулярная масса}_B \cdot r_0^2}{\text{молекулярная масса}_A + \text{молекулярная масса}_B}$

Б) * $I = \frac{\text{молекулярная масса}_A \cdot \text{молекулярная масса}_B}{\text{молекулярная масса}_A + \text{молекулярная масса}_B} \cdot 1 \text{ а.е.м.} \cdot r_0^2$

В) $I = \frac{\text{молекулярная масса}_A + \text{молекулярная масса}_B}{\text{молекулярная масса}_A \cdot \text{молекулярная масса}_B} \cdot r_0^2$

Г) $I = \frac{\text{молекулярная масса}_A + \text{молекулярная масса}_B}{\text{молекулярная масса}_A \cdot \text{молекулярная масса}_B} \cdot 1 \text{ а.е.м.} \cdot r_0^2$

12. Выберите правильную формулу для расчета разрешенных уровней вращательной энергии двухатомной молекулы

A) * $E_J = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \cdot J(J+1)$

B) $E_J = \frac{h}{8\pi^2 I} \cdot J(J+1)$

Б) $E_J = \frac{h^2}{8\pi I} \cdot J(J+1)$

Г) $E_J = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \cdot BJ(J+1)$

13. Укажите правильную формулу для расчета вращательной постоянной:

A) * $B = \frac{h}{8\pi^2 Ic}$

B) $B = \frac{h}{8\pi I}$

Б) $B = \frac{h^2}{8\pi^2 Ic}$

Г) $B = \frac{h^2}{8\pi^2 I}$

14. Укажите правило отбора для разрешенных переходов между соседними вращательными уровнями двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора:

A) * $\Delta J = \pm 1$

B) $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$

Б) $\Delta J = 0, \pm 1$

Г) $\Delta J = \pm 2$

15. Выберите правильную формулу для расчета вращательных термов двухатомной молекулы в приближении нежесткого ротатора

A) * $\varepsilon = B \cdot J(J+1) - DJ^2(J+1)^2$

B) $\varepsilon = B \cdot (J+1) - DJ^2$

Б) $\varepsilon = B \cdot J^2 - DJ(J+1)$

Г) $\varepsilon = B \cdot J(J+1) - D(J+1)^2$

16. Укажите правильную формулу для расчета энергии гармонического осциллятора:

A) * $E = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_e)^2$

B) $E = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_e)$

Б) $E = k \cdot \sqrt{(r - r_e)}$

Г) $E = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_e)^{3/2}$

17. Укажите правило отбора для двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора:

A) * $\Delta v = \pm 1$

B) $\Delta v = \pm 1, \pm 2$

Б) $\Delta v = 0, \pm 1$

Г) $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3$

18. Укажите правильную формулу для расчета частоты колебаний двухатомной молекулы

A) * $\omega_{\text{кол}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

B) $\omega_{\text{кол}} = \frac{1}{2hc} \sqrt{\frac{k}{\pi}}$

Б) $\omega_{\text{кол}} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

Г) $\omega_{\text{кол}} = \frac{1}{2h^2 c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

19. Укажите правильную формулу для расчета нулевого уровня энергии двухатомной молекулы в приближении ангармонического осциллятора:

A) * $E_0 = \frac{1}{2} h\omega_{\text{кол}}$

B) $E_0 = hc\omega_{\text{кол}}$

Б) $E_0 = \frac{1}{2} h\omega_{\text{кол}} c$

Г) $E_0 = h^2 c\omega_{\text{кол}}$

20. Укажите правильную формулу для расчета энергии двухатомной молекулы в приближении ангармонического осциллятора:

A) * $E = \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2$

B) $E = \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)$

Б) $E = \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) + \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2$

Г) $E = \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)$

21. Укажите правильную формулу для расчета колебательно-вращательного термина двухатомной молекулы в приближении нежесткого ротатора и гармонического осциллятора:

$$\begin{aligned} \text{А) } \varepsilon_{J,v} &= B \cdot J(J+1) - DJ^2(J+1)^2 + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \\ \text{Б) } \varepsilon_{J,v} &= B \cdot J^2(J+1) - D(J+1) + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \\ \text{В) } \varepsilon_{J,v} &= B \cdot J^2(J+1) - DJ_2(J+1)^2 - \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \\ \text{Г) } \varepsilon_{J,v} &= B \cdot J(J+1) - DJ^2(J+1)^2 + \omega_e(v + \frac{1}{2}) + \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \end{aligned}$$

22. Укажите правило отбора для переходов двухатомной молекулы между различными колебательно-вращательными состояниями:

$$\begin{aligned} \text{А) } \Delta v &= \pm 1, \pm 2, \pm 3, \Delta J = \pm 1 & \text{В) } \Delta v &= \pm 1, \pm 2, \Delta J = 0, \pm 1 \\ \text{Б) } \Delta v &= 0, \pm 1, \Delta J = \pm 1 & \text{Г) } \Delta v &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \Delta J = \pm 1, \pm 2 \end{aligned}$$

23. Укажите правильную формулу для расчета термов для R-ветвей колебательно-вращательного спектра:

$$\begin{aligned} \text{А) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 + 2B(J''+1), J'' = 0, 1, 2 & \text{В) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 + 2BJ''(J''+1), J'' = 0, 1, 2 \\ \text{Б) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 - 2B(J''+1), J'' = 0, 1, 2 & \text{Г) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 + 2B(J''+1)^2, J'' = 0, 1, 2 \end{aligned}$$

24. Укажите правильную формулу для расчета термов для P-ветвей колебательно-вращательного спектра:

$$\begin{aligned} \text{А) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 + 2B(J''+1), J'' = 0, 1, 2 & \text{В) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 + 2BJ''(J''+1), J'' = 0, 1, 2 \\ \text{Б) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 - 2B(J'+1), J'' = 0, 1, 2 & \text{Г) } \varepsilon_{J,v} &= v_0 + 2B(J'+1)^2, J' = 0, 1, 2 \end{aligned}$$

25. Укажите правильную формулу для расчета взаимодействий вращений и колебаний:

$$\begin{aligned} \text{А) } B_v &= B_e - \alpha(v + \frac{1}{2}) & \text{В) } B_v &= B_e J(J+1) - \alpha(v + \frac{1}{2}) \\ \text{Б) } B_v &= B_e + \alpha(v + \frac{1}{2}) & \text{Г) } B_v &= B_e - \frac{\alpha}{2}(v+1)^2 \end{aligned}$$

26. Укажите правило отбора для вращательных спектров комбинационного рассеяния двухатомной молекулы:

$$\begin{aligned} \text{А) } \Delta J &= 0, \pm 1 & \text{В) } \Delta J &= 0, \pm 1, \pm 2 \\ \text{Б) } \Delta J &= 0, \pm 2 & \text{Г) } \Delta J &= \pm 1, \pm 2 \end{aligned}$$

27. Укажите правильную формулу для расчета волновых чисел вращательного спектра двухатомных молекул при стоксовом излучении:

$$\begin{aligned} \text{А) } v &= v_{\text{возб}} + B(4J+6) & \text{В) } v &= v_{\text{возб}} + 2BJ(J+1) \\ \text{Б) } v &= v_{\text{возб}} - B(4J+6) & \text{Г) } v &= v_{\text{возб}} - 2BJ(J+1) \end{aligned}$$

28. Укажите правильную формулу для расчета волновых чисел колебательного спектра двухатомных молекул при антистоксовом излучении:

$$\begin{aligned} \text{А) } v &= v_{\text{возб}} + \omega_e & \text{В) } v &= v_{\text{возб}} + \omega_e(v + \frac{1}{2}) \\ \text{Б) } v &= v_{\text{возб}} - \omega_e & \text{Г) } v &= v_{\text{возб}} - \omega_e(v + \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

29. Укажите правильную формулу для расчета полной энергии двухатомной молекулы:

$$\begin{aligned} \text{А) } \varepsilon_{\text{полн}} &= \varepsilon_{\text{эл}} + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 & \text{В) } \varepsilon_{\text{полн}} &= \varepsilon_{\text{вращ}} + \omega_e(v + \frac{1}{2})^2 \\ \text{Б) } \varepsilon_{\text{полн}} &= \varepsilon_{\text{эл}} + \omega_e(v + \frac{1}{2})^2 & \text{Г) } \varepsilon_{\text{полн}} &= \varepsilon_{\text{вращ}} + \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 \end{aligned}$$

30. Укажите правильную формулу для расчета рэлеевской линии спектра комбинационного рассеяния двухатомной молекулы:

$$A) \quad v = v_{\text{возб}}$$

$$B) \quad v = v_{\text{возб}} + \omega_e$$

$$B) \quad v = v_{\text{возб}} - \omega_e$$

$$Г) \quad v = v_{\text{возб}} - B(4J + 6)$$

Критерии и методика оценивания результатов тестирования:

Один тестовый вопрос (30 вопросов).

- 1 балл выставляется студенту, если ответ правильный;
- 0 баллов выставляется студенту, если ответ неправильный.

Пример контрольной работы

- 1) Волновые числа первых трех линий вращательного спектра поглощения молекулы H^{35}Cl равны 20,88; 41,74 и 62,58 см^{-1} . Определите вращательную постоянную B_0 , момент инерции I_0 и межъядерное расстояние r_0 с точностью до трех значащих цифр.
- 2) Характеристическая частота полностью симметричного колебания двойной связи в алкенах составляет 1620 см^{-1} . При какой длине волны (в нм) она будет проявляться в КР-спектре, если в качестве источника возбуждения пользоваться линией 488,0 нм аргонового лазера?

- Критерии и методика оценивания результатов контрольных работ

- «зачтено» выставляется студенту, если работа выполнена как минимум на 70% и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой;
- «не зачтено» выставляется студенту, если работа выполнена менее, чем на 70% или в полном объеме, но имеет один из недостатков:
 - в работе допущены ошибки при выводе основных формул;
 - нет определенной логической последовательности, неточно используется специализированная терминология;
 - отсутствует общее понимание вопроса,
 - студент вообще не приступал к выполнению контрольной работы.

Коллоквиум № 1 по теме «Симметрия»

Раздел Симметрия молекул. Точечные группы симметрии

Суть коллоквиума заключается в определении элементов симметрии для 5 молекул, указанных преподавателем. Необходимо указать точечную группу симметрии по Шенфлису для молекул из таблицы 1.

Критерии оценки результатов коллоквиума № 1 (в баллах):

- 10 баллов выставляется студенту, если студент правильно определяет все элементы симметрии для пяти указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии;
- 8-9 баллов выставляется студенту, если студент правильно 1) определяет все элементы симметрии для четырех указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает мелкие ошибки при установлении группы симметрии, но элементы симметрии определяет безошибочно.
- 6-7 баллов выставляется студенту, если студент 1) правильно определяет все элементы симметрии для трех указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает значительные ошибки при установлении группы симметрии, элементы симметрии определяет с ошибками для всех 20% молекул;
- 4-5 балла выставляется студенту, если студент 1) правильно определяет все элементы симметрии для двух указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает значительные ошибки при установлении группы симметрии, элементы симметрии определяет с ошибками для всех 50% молекул;
- 2-3 балла выставляется студенту, если студент 1) правильно определяет все элементы симметрии для двух указанных молекул и безошибочно устанавливает для них группу симметрии; 2) допускает значительные ошибки при установлении группы симметрии, элементы симметрии определяет с ошибками для всех 80% молекул;
- 0 баллов выставляется студенту, если студент не способен определить элементы симметрии хотя бы для одной молекулы и соответственно не способен установить группу симметрии.

Коллоквиум по всем темам дисциплины.

Вопросы к коллоквиуму .

1. Закономерности в геометрической конфигурации молекул. Длины связей и валентные углы.
2. Дипольный момент и изомерия молекул.
3. Электронные спектры двухатомных молекул.
4. Поляризуемость молекулы.
5. Спектральные области.
6. Закономерности в углах внутреннего вращения, конформеры.
7. Равновесная геометрическая конфигурация молекулы.
8. Колебательные спектры комбинационного рассеяния.
9. Энергетические состояния двухатомной молекулы.
10. Поляризуемость молекулы.
11. Статистическое распределение молекул по энергетическим состояниям.
12. Отталкивание электронных пар.
13. Интенсивность электронно-колебательных спектров, принцип Франка-Кондона.
14. Поляризация диэлектриков.
15. Равновесная геометрическая конфигурация молекулы.
16. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекул.
17. Координаты атомов (ядер) молекулы.
18. Поляризация диэлектриков.
19. Ангармонический осциллятор.
20. Внутреннее вращение в 1,2-дихлорэтаноле.
21. Электрический дипольный момент в классической теории.
22. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Квантовый подход к КР.
23. Поляризация диэлектрика в переменном поле. Мольная рефракция.
24. Симметрия молекул.
25. Взаимодействие вращений и колебаний.
26. Классическая модель молекулы. Основные понятия.
27. Энергетические состояния двухатомной молекулы.
28. Статистическое распределение молекул по энергетическим состояниям.
29. Спектральные области.
30. Двухатомная молекула как жесткий ротатор.
31. Нежесткий ротатор.
32. Гармонический осциллятор.
33. Ангармонический осциллятор.
34. Колебательно-вращательные переходы в двухатомной молекуле.
35. Взаимодействие вращений и колебаний.
36. Квантовый подход к комбинационному рассеянию.
37. Вращательные спектры комбинационного рассеяния линейных молекул.
38. Колебательные спектры комбинационного рассеяния.
39. Интенсивность электронно-колебательных спектров: принцип Франка-Кондона.

Критерии оценки результатов итогового коллоквиума (в баллах):

0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 8 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 10 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом разделе дисциплины.

**Перечень дискуссионных тем для круглого стола
(дискуссии, полемики, диспута, дебатов)
по дисциплине *Строение вещества***

1. Для чего необходимо химику уметь определять элементы симметрии и устанавливать группу симметрии для разных молекул.
2. Какие существуют недостатки и преимущества у символики Шенфлиса?

Критерии оценки (в баллах):

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;
- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе;
- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе;
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе.

Групповые творческие задания (проекты):

1. Студенты разбиваются на пары. Каждый из них составляет по 10 вопросов по соответствующей теме занятия. Затем студенты, состоящие в одной паре обмениваются карточками с вопросами и каждый отвечает на все 10 вопросов своего напарника. Напарники выставляют друг другу оценки по предложенной ниже шкале.

Индивидуальные творческие задания (проекты):

1. Каждый из студентов оформляет по 10 карточек по соответствующей теме занятия, при этом каждая карточка с одной стороны содержит по одному определению (молекула – это совокупность связанных атомов...) или формуле и т.д.. С другой стороны карточки (с обратной) указывается название написанной формулы, либо формулируется задание «дайте определение понятию «молекула», «атом» и т.д.. Затем студенты по очереди подходят к преподавателю и он случайным образом достает по 5 карточек и просит либо воспроизвести формулу, изображенную на обратной стороне карточке, либо сформулировать определение понятия, указанного на обороте карты. Формулировка вопроса преподавателя зависит от того, что указано в карточке, составленной студентом.

Карточки, на которые студент дал правильный исчерпывающий ответ, откладываются в правую стопку. Соответственно, карточки, на которые студент дал нечеткие или неправильные ответы, откладываются в левую стопку.

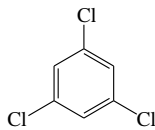
Критерии оценки (в баллах):

- 1 балл выставляется студенту, если студент правильно ответил на три карточки из пяти;
- 0 баллов выставляется студенту, если студент неправильно ответил на три карточки из пяти

Комплект разноуровневых ситуационных задач (заданий)
по дисциплине Строение вещества

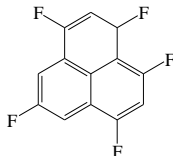
1 Задачи репродуктивного уровня

Задача (задание) 1. Сколько вертикальных плоскостей симметрии в молекуле 1,3,5-трихлорбензола.



Задача (задание) 2 Сколько вертикальных плоскостей симметрии в молекуле C_5H_5 .

Задача (задание) 3. Сколько вертикальных плоскостей симметрии в молекуле 1,3,4,6,8-пентафтор-1Н-феналена:



2 Задачи реконструктивного уровня

Задача (задание) 1. Определите, какие элементы симметрии характерны для 1,3,5-трихлорбензола? На основании найденных элементов симметрии установите группу симметрии этой молекулы.

Задача (задание) 2 Определите, какие элементы симметрии характерны для C_5H_5 ? На основании найденных элементов симметрии установите группу симметрии этой молекулы.

Задача (задание) 3 Определите, какие элементы симметрии характерны для? На основании найденных элементов симметрии установите группу симметрии этой молекулы.

3 Задачи творческого уровня

Задача (задание) 1 Предложите варианты замещения атомов водорода в молекуле 1,3,5-трихлорбензола для понижения ее симметрии.

Задача (задание) 2 Предложите варианты замещения атомов водорода в молекуле C_5H_5 для понижения ее симметрии до C_s .

Задача (задание) 2 Предложите варианты замещения атомов водорода в молекуле 1,3,4,6,8-пентафтор-1Н-феналена для понижения ее симметрии до C_s .

Критерии оценки (в баллах):

- 1 балл выставляется студенту, если он правильно решил одну задачу;
- 0 баллов выставляется студенту, если он допустил ошибки при решении конкретной задачи.

4.3. Рейтинг-план дисциплины

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

Основная литература:

1. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.М. Камышов, Е.Г. Мирошникова, В.П. Татауров. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 236

- с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/105983>.
2. Бёккер, Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс] : руководство / Ю. Бёккер. — Электрон. дан. — Москва : Техносфера, 2009. — 528 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/73013>.
 3. Калашников, Н.П. Практикум по решению задач по общему курсу физики. Основы квантовой физики. Строение вещества. Атомная и ядерная физика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.П. Калашников, Н.М. Кожевников, Т.В. Котырло, Г.Г. Спирын ; под ред. Калашникова Н. П.. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 240 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/49468>.
 4. Зайнуллин, Р.А. Применение спектроскопии в органической химии [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Р.А. Зайнуллин, О.С. Куковинец, Р.В. Кунакова; АН РБ, Отделение химии. — Уфа: Гилем, 2007. — Электрон. версия печ. публикации.— Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Zaynullin_R.A. Kukovinec_O.S. Kunakova_R.V.Primenenie_spektroskopii_v_organicheskoy_himii._Ufa_Gilem,_2007.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Zaynullin_R.A._Kukovinec_O.S._Kunakova_R.V.Primenenie_spektroskopii_v_organicheskoy_himii._Ufa_Gilem,_2007.pdf)>.
 5. Куковинец, О.С. Применение оптических методов для идентификации органических соединений [Электронный ресурс]: учеб.пособие / О.С. Куковинец; Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2014. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: <URL:https://elib.bashedu.ru/dl/local/Kukovinec_Primenenie_opticheskikh_metodov_up_2014.pdf>.
 6. Доломатов, М. Ю. Исследование электронных характеристик и свойств молекул и наночастиц [Электронный ресурс]: учеб. пособие для студ. физических специальностей / М. Ю. Доломатов, Р. З. Бахтизин, Д. О. Шуляковская; БашГУ. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2014 — 213 с. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: <URL:<https://elib.bashedu.ru/dl/read/DolomatovIssElektrHaraktMolekNanoch.pdf>>.
 7. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] : учебное пособие / Каплан И.Г. ; под ред. Н. Ф. Степанова ; пер.с англ. Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина.. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 397 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/94111>.
 8. Симметрия [Электронный ресурс]: методическая разработка по дисциплине «Строение вещества» для студентов химического факультета: методические указания / Башкирский государственный университет; сост. В.Р. Хайруллина; Э.М. Хамитов. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2013. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ возможен через Электронную библиотеку БашГУ. — <URL:https://elib.bashedu.ru/dl/read/Hairullina_Hamitov_sost_Simmetrija_mu_2013.pdf>.

Дополнительная литература:

9. Доломатов, М. Ю. Физические основы наноэлектроники [Электронный ресурс]: учеб. пособие / М. Ю. Доломатов; БашГУ. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2014. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: <URL:<https://elib.bashedu.ru/dl/read/DolomatovFizOsnovyNanoelektroniki.pdf>>.
10. Краткий курс лекций по физике [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Башкирский государственный университет, Бирский филиал; авт.- сост. А.С. Чиглинцева; Ф.Р. Хузина; А.А. Русинов; О.А. Шепелькевич. — Бирск: БФ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему

«Электронная библиотека БашГУ»: <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Chiglinceva i dr_Kratkij kurs lekcij po fizike up_2015.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Chiglinceva_i_dr_Kratkij_kurs_lekcij_po_fizike_up_2015.pdf)>.

11. Краткий курс лекций по физике [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Башкирский государственный университет, Бирский филиал; авт.- сост. А.С. Чиглинцева; Ф.Р. Хузина; А.А. Русинов; О.А. Шепелькевич. — Бирск: БФ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Chiglinceva i dr_Kratkij kurs lekcij po fizike up_2015.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Chiglinceva_i_dr_Kratkij_kurs_lekcij_po_fizike_up_2015.pdf)>.
12. Салихов, Р.Б. Атомная физика [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Р.Б. Салихов; Башкирский государственный педагогический университет. — Уфа: БГПУ, 2007. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Salihov ANATOMIYA FIZIK_Uch.pos_2007.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Salihov_ANATOMIYA_FIZIK_Uch.pos_2007.pdf)>.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License.
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU.

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

<p align="center">Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы</p>	<p align="center">Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</p>	<p align="center">Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа</p>
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (корпус химического факультета), аудитория №311 (корпус химического факультета), аудитория № 310 (корпус химического факультета), аудитория № 305 (корпус химического факультета).</p> <p>2. учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 004 (корпус химического факультета), аудитория № 005 (корпус химического факультета).</p> <p>3. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (корпус химического факультета), аудитория №311 (корпус химического факультета), аудитория № 310 (корпус химического факультета), аудитория № 305 (корпус химического факультета), аудитория № 001 (корпус химического фа-</p>	<p align="center">Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p align="center">Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p align="center">Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p align="center">Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p align="center">Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p align="center">Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MD i5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SS1450/ SKS1/SS1750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p align="center">Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Читальный зал № 1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Wi-Fi доступ для мо-</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License</p>

<p>культета), аудитория № 002 (корпус химического факультета), аудитория № 006 (корпус химического факультета), аудитория № 007 (корпус химического факультета), аудитория № 008 (корпус химического факультета), аудитория № 004 (корпус химического факультета), аудитория № 005 (корпус химического факультета).</p> <p>4. помещения для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (корпус физмата), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (корпус института права), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (корпус химического факультета)</p> <p>5. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория № 416 (корпус химического факультета).</p>	<p>бильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p>Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p>Читальный зал № 5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p>Читальный зал № 6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p>Читальный зал № 7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p>Лаборатория № 418 Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5kBT; 2A,220/0-250В),3604, 99p T.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперметрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung BX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolopino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD<TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Вепс1.клавиат ура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p> <p>Лаборатория № 416 Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель АА-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук Fujitsu Lifebook F530 Intel Core i3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/ВТ/15.6"/Wi n7НВ+office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	
--	---	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ
дисциплины Стрoение вещества на 5-6 семестр
очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	4/144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	118,7
лекций	68
практических/ семинарских	-
лабораторных	50
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,7
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	25,3
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	-

Форма(ы) контроля:
Зачет во 2 семестре

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Введение. Классическая и квантово-механическая теории строения молекул.	6	–	4	2	[1-3]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, зачету	лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; рефераты; доклады; контрольные работы; коллоквиум; комплект разноуровневых задач; круглый стол; тест
2	Классическая модель молекулы 1.1 Основные понятия. 1.2 Координаты атомов (ядер) молекулы. 1.3 Равновесная геометрическая конфигурация молекулы. 1.4 Межъядерные расстояния, валентные углы, углы внутреннего вращения. 1.5 Отталкивание электронных пар 1.5.2 Молекулы с р-связями. 1.6 Закономерности в геометрической конфигурации молекул. 1.6.1 Закономерности в равновесных значениях длин связей. 1.6.2 Закономерности в валентных углах. 1.6.3 Закономерности в углах внутреннего вращения, конформеры. 1.6.4 Внутреннее вращение в 1,2-дихлорэтане.	12	–	6	4	[1-3, 7]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, зачету	лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; рефераты; доклады; контрольные работы; коллоквиум; комплект разноуровневых задач; круглый стол; тест
3	Тема 2. Симметрия молекул.	10	–	12	4	[1, 7-8]		лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; рефераты; доклады; контрольные работы; коллоквиум; комплект разноуровневых за-

								дач; круглый стол; тест
4	Тема 3. Электрические свойства молекул. 3.1 Дипольные моменты молекул. 3.1.1 Электрический дипольный момент в классической теории. 3.1.2 Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекул. 3.1.3 Дипольный момент и изомерия молекул. 3.2 Поляризуемость молекулы. 3.3 Связь электрических свойств молекул с электрическими свойствами вещества. 3.3.1 Поляризация диэлектриков. 3.3.2 Поляризация диэлектрика в переменном поле. 3.3.3 Мольная рефракция.	10	–	6	4	[1-3, 9-12]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, зачету	лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; рефераты; доклады; контрольные работы; коллоквиум; комплект разноуровневых задач; круглый стол; тест
5	Тема 4. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул. 4.1 Энергетические состояния двухатомной молекулы. 4.2 Статистическое распределение молекул по энергетическим состояниям 4.3 Спектральные области. 4.4 Вращательные состояния молекул. 4.4.1 Двухатомная молекула как жесткий ротатор. 4.4.2 Нежесткий ротатор. 4.5 Колебательные состояния. 4.5.1 Гармонический осциллятор. 4.5.2 Ангармонический осциллятор. 4.5.4. Взаимодействие вращений и колебаний. 4.5.3 Колебательно – вращательные переходы в двухатомной молекуле. 4.6 Спектроскопия комбинационного рассеяния. 4.6.1 Квантовый подход к КР. 4.6.2 Вращательные спектры комбинационного рассеяния линейных молекул. 4.6.3. Колебательные спектры КР. 4.7 Электронные спектры двухатомных молекул. 4.7.1 Интенсивность электронно-колебательных спектров: принцип Франка-Кондона.	30		22	11,3	[1-6]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, контрольной работе, зачету	лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; рефераты; доклады; контрольные работы; коллоквиум; комплект разноуровневых задач; круглый стол; тест
Всего часов:		68	–	50	25.3			

Рейтинг – план дисциплины

Б1.О.26 Строение вещества
направление/специальность 04.03.01. Химия
курс 3, семестры 5-6

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Подготовка презентации по теме раздела и выступление с ней на практикуме / участие в работе круглого стола	5,0	1	0	5,00
2. Выполнение лабораторных работ	5,00	2	0	10,00
Рубежный контроль				
1. Коллоквиум № 1 (по практике)	10,00	1	0	5,00
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Решение типовых задач	1,00	5	0	5,00
2. Выполнение лабораторных работ	5,00	4	0	20,00
3. Выступление с докладом	5,00	1	0	5,00
4. Групповые и индивидуальные творческие задания	5,00	1	0	5,00
Рубежный контроль				
1. Коллоквиум по всем темам дисциплины	10,00	1	0	10,00
2. Тест	30	1	0	30,00
Посещаемость				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6,00
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий			0	-10,00
Поощрительные баллы				
Участие в олимпиадах	1,00		0	1,00
Участие в конференциях	2,00		0	2,00
Публикация тезисов	3,00		0	3,00
Публикация статей	4,00		0	4,00
			Итого	10
Итоговый контроль				
Зачет			60	100
Письменная контрольная работа (по практике)			Не зачтено	зачтено