

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Актуализировано:
на заседании кафедры
протокол № 8 от «07» июня 2017 г.
Зав. кафедрой Мустафин А.Г.

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

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина **Строение вещества**

Базовый цикл, базовая часть Б1.Б.08 _____

программа специалитета

Направление подготовки (специальность).
04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки

Аналитическая химия

Биоорганическая химия

Высокомолекулярные соединения

Неорганическая химия

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

| | |
|--|---|
| Разработчик (составитель) <u>доцент, д.х.н., доцент</u> (должность, ученая степень, ученое звание) | <u>Хайруллина В.Р.</u> (подпись, Фамилия И.О.) |
|--|---|

Для приема: 2014 г.

Уфа 2017 г.

Составитель / составители: Хайруллина В.Р.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры протокол от «07» июня 2017 г. № 8

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры: _____, протокол № 11 от «01» июня 2018 г.

Заведующий кафедрой



/Мустафин А.Г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____, протокол № ____ от «____» _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____/ _____ Ф.И.О./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____, протокол № ____ от «____» _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____/ _____ Ф.И.О./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____, протокол № ____ от «____» _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____/ _____ Ф.И.О./

Список документов и материалов

| | |
|--|----|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы | 4 |
| 2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы | 7 |
| 3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся) | 7 |
| 4. Фонд оценочных средств по дисциплине | 8 |
| 4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания | 8 |
| 4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций | 11 |
| 4.3. <i>Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)</i> | 23 |
| 5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины | 23 |
| 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины | 24 |
| 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины | 24 |
| 6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине | 25 |

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

(с ориентацией на карты компетенций)

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

| Результаты обучения | | Формируемая компетенция (с указанием кода) | Примечание |
|---------------------|---|--|------------|
| Знания | теоретические основы базовых химических дисциплин | ОПК-1 способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач | |
| | Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач | | |
| | Основные понятия и законы химии | ПК-3 пониманием основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | |
| | основные законы химии и смежных наук | ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов | |
| Умения | выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих | ОПК-1 способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач | |

| | | | |
|--|--|--------------------------|--|
| | закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин | | |
| | решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам | | |
| | применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при решении профессиональных задач | | |
| | готовить элементы документации, проекты планов и программ проведения отдельных этапов работ в профессиональной сфере деятельности | | |
| | анализировать и обрабатывать научно-техническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии | | |
| | разрабатывать учебно-методические материалы для реализации образовательных программ различного уровня и направленности, связанных с химией и смежными дисциплинами | | |
| | Применять | ПК-3 владение пониманием | |

| | | | |
|--|--|---|--|
| | основные законы химии | основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | |
| | - применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов | ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов | |
| Владения (навыки / опыт деятельности) | навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам | ОПК-1 способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач | |
| | навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин при решении конкретных химических и материаловедческих задач | | |
| | навыками обработки и анализа научно-технической информации и результатов отдельных этапов работ с учетом теоретических основ традиционных и новых разделов химии | | |
| | навыками организации и проведения учебно-производственного процесса при реализации | | |

| | | | |
|--|---|--|--|
| | образовательных программ различного уровня естественно-научной направленности | | |
| | Системой фундаментальных понятий химии. | ПК-3 владение пониманием основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | |
| | основными методами анализа и обработки полученных результатов. | ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов | |

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

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

Дисциплина изучается на 2 курсе в 4 семестре.

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 с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

ОПК-1 способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач

| Этап освоения компетенции | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Не зачтено | Зачтено |
|---------------------------|---|------------|--|
| Первый этап | Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин | Не знает | Имеет четкое, целостное представление о содержании основных химических курсов и общих закономерностях химических процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин |
| | Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач | Не знает | Знает теоретические основы не только традиционных, но и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач |
| Второй этап | выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин | Не умеет | Умеет планировать работу и интерпретировать полученные результаты с привлечением теоретических представлений базовых химических дисциплин |
| | решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам | Не умеет | Умеет решать типовые задачи из базовых курсов химии |
| | применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при решении профессиональных задач | Не умеет | Умеет выбирать необходимые методы химического и физико-химического анализа сложных объектов |
| | готовить элементы документации, проек-ты планов и про-грамм проведения отдельных этапов работ в профес-сиональной сфере | Не умеет | Умеет самостоятельно готовить элементы документации для решения задач профессиональной сферы деятельности |

| | | | |
|-------------|---|----------------------|---|
| | деятельности | | |
| | анализировать и обрабатывать научнотехническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии | Не умеет Не умеет | Умеет решать учебные задачи, имитирующие реальные ситуации из практики НИР |
| | разрабатывать учебнометодические материалы для реализации образовательных программ различного уровня и направленности, связанных с химией и смежными дисциплинами | Не умеет | Умеет само-стоятельно разработать план проведения занятий по одному из разделов общей химии |
| Третий этап | навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам | Не владеет | Владеет навыками воспроизведения освоенного учебного материала по основным химическим дисциплинам |
| | навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин при решении конкретных химических и материаловедческих задач | Не владеет | Владеет общими представлениями о возможности практического применения теоретических основ химии, но допускает неточности при их использовании применительно к поставленной задаче |
| | навыками обработки и анализа научно-технической информации и результатов отдельных этапов работ с учетом теоретических основ традиционных и новых разделов химии | Не владеет | Владеет навыками анализа научно-технической информации по общим разделам химии, но испытывает затруднения при их применении к решению реальных задач |
| | навыками организации и проведения учебнопроизводственного процесса при реализации образовательных программ различного уровня естественно-научной направленности | Не владеет | Владеет навыками проведения занятий по отдельным разделам образовательных программ СПО, ДПО по готовым методическим разработкам |

Компетенция: **ПК-3** пониманием основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания

| Этап освоения компетенции | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения) | Не зачтено | Зачтено |
|---------------------------|---|------------|---------|
|---------------------------|---|------------|---------|

| | | | |
|-------------|--|------------|--|
| | компетенций) | | |
| Первый этап | Знать: Основные понятия и законы химии | Не знает | Сформированное и систематизированное представление о химической науке |
| Второй этап | Уметь: Применять основные законы химии | Не умеет | Сформированное умение решать стандартные задачи на применение фундаментальных химических понятий и законов |
| Третий этап | Владеть: Системой фундаментальных понятий химии. | Не владеет | Успешное и системное владение системой фундаментальных химических понятий |

КОМПЕТЕНЦИЯ: **ПК-4** способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов

| Этап освоения компетенции и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Не зачтено | Зачтено |
|-----------------------------|---|------------|---|
| Первый этап | Знать: основные законы химии и смежных наук | Не знает | Полные и системные знания о естественнонаучных законах и закономерностях развития химической науки |
| Второй этап | Уметь: применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов | Не умеет | Сформированное умение решать типичные задачи, связанные с применением естественнонаучных законов и закономерностей развития химической науки при анализе полученных результатов |
| Третий этап | Владеть: основными методами анализа и обработки полученных результатов | Не владеет | Успешное и системное владение навыками применения основных естественнонаучных законов и закономерностей развития химической науки при анализе полученных результатов |

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

| Результаты обучения | | Формируемая компетенция (с указанием кода) | Примечание |
|---------------------|---|--|--|
| Знания | теоретические основы базовых химических дисциплин | ОПК-1 способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач | лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; презентации; контрольные работы; комплект разноуровневых задач; коллоквиум; круглый стол; тест |
| | Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов химии и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач | | |
| | Основные понятия и законы химии | ПК-3 пониманием основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | |
| | основные законы химии и смежных наук | ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов | |
| Умения | выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих | ОПК-1 способность вос-принимать, развивать и ис-пользовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональ-ных задач | лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; презентации; контрольные работы; комплект разноуровневых |

| | | | |
|--|---|--|--|
| | закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин | | задач; коллоквиум; круглый стол; тест |
| | решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам | | |
| | применять знания общих и специфических закономерностей различных областей химической науки при решении профессиональных задач | | |
| | готовить элементы документации, проекты планов и программ проведения отдельных этапов работ в профессиональной сфере деятельности | | |
| | анализировать и обрабатывать научно-техническую информацию на основе теоретических представлений традиционных и новых разделов химии | | |
| | разрабатывать учебно-методические материалы для реализации образовательных программ различного уровня и направленности, связанных с химией и смежными | | |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | дисциплинами | | |
| | Применять основные законы химии | ПК-3 владение пониманием основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | |
| | - применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов | ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов | |
| Владения (навыки / опыт деятельности) | навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам | ОПК-1 способность вос-принимать, развивать и ис-пользовать теоретиче-ские основы традиционных и новых разделов химии при решении профессио-наль-ных задач | лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; презентации; контрольные работы; комплект разноуровневых задач; коллоквиум; круглый стол; тест |
| | навыками использования теоретических основ базовых химических дисциплин при решении конкретных химических и материаловедческих задач | | |
| | навыками обработки и анализа научно-технической информации и результатов отдельных этапов работ с учетом теоретических основ традиционных и новых разделов химии | | |
| | навыками организации и | | |

| | | | |
|--|---|--|--|
| | проведения учебно-производственного процесса при реализации образовательных программ различного уровня естественно-научной направленности | | |
| | Системой фундаментальных понятий химии. | ПК-3 владение пониманием основных закономерностей развития химической науки, владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | |
| | основными методами анализа и обработки полученных результатов. | ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов | |

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).

Критерии оценки (в баллах) аудиторной и домашней работы

- 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.

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.

«2балла»: 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:

A) $E_e \gg E_v \gg E_J$

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

A) $E = E_e + E_v + E_J$

в) $E = E_v + E_J$

Б) $E = E_e + E_v$

г) $E = E_e + E_v - E_J$

3. Выберите правильный ответ:

A) $E_e = 10^5 \div 10^6$ 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:

A) $\omega_e \gg \omega_e X_e > 0$

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:

A) $E_v = 10^4$ 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:

A) $E_J \sim 10^2$ 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:

A) 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) $\varepsilon = \frac{E}{hc}$ В) $\varepsilon = \frac{E}{hc\lambda}$
 Б) $\varepsilon = \frac{hc}{\lambda}$ Г) $\varepsilon = \frac{hc\lambda}{E}$

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

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

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

А) $B = \frac{h}{8\pi^2 Ic}$ В) $B = \frac{h}{8\pi I}$
 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:

- А) $\Delta J = \pm 1$ В) $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$
 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

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

- А) $E = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_e)^2$ В) $E = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (r - r_e)$
 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:

- А) $\Delta v = \pm 1$ В) $\Delta v = \pm 1, \pm 2$
 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

- А) $\omega_{\text{кол}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ В) $\omega_{\text{кол}} = \frac{1}{2hc} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$
 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:

- А) $E_0 = \frac{1}{2} h \omega_{\text{кол}}$ В) $E_0 = hc \omega_{\text{кол}}$
 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:

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

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

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

А) $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \Delta J = \pm 1$ В) $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \Delta J = 0, \pm 1$
 Б) $\Delta v = 0, \pm 1, \Delta J = \pm 1$ Г) $\Delta v = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \Delta J = \pm 1, \pm 2$

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

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

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

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

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

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

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

А) $\Delta J = 0, \pm 1$ В) $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$
 Б) $\Delta J = 0, \pm 2$ Г) $\Delta J = \pm 1, \pm 2$

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

А) $\nu = \nu_{\text{возб}} + B(4J+6)$ В) $\nu = \nu_{\text{возб}} + 2BJ(J+1)$
 Б) $\nu = \nu_{\text{возб}} - B(4J+6)$ Г) $\nu = \nu_{\text{возб}} - 2BJ(J+1)$

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

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

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

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

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

$$\begin{array}{ll} \text{А)} \quad v = v_{\text{возб}} & \text{В)} \quad v = v_{\text{возб}} + \omega_e \\ \text{Б)} \quad v = v_{\text{возб}} - \omega_e & \text{Г)} \quad v = v_{\text{возб}} - B(4J+6) \end{array}$$

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

- 10 баллов выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой;

- 8-9 баллов выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме, но имеет один из недостатков:

в работе допущены два недочета при освещении основного содержания ответа; нет определенной логической последовательности, неточно используется

специализированная терминология;

- 6-7 баллов выставляется студенту, если работа выполнена неполно, не показано общее понимание вопроса, имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, при знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность основных умений и навыков.

- 4-5 баллов выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 50 %.

- 1-3 балла выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 70 %.

- 0 баллов выставляется студенту, если студент вообще не приступал к выполнению контрольной работы.

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 (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.

Перечень дискуссионных тем для круглого стола

(дискуссии, полемики, диспута, дебатов)

по дисциплине *Строение вещества*

(наименование дисциплины)

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.

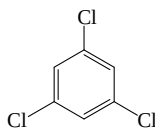
Критерии оценки (в баллах):

- 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 (наименование дисциплины)

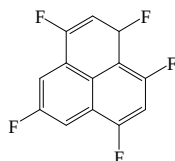
1 Задачи репродуктивного уровня

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

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 2.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

Основная литература:

1. Бёккер, Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс] : руководство / Ю. Бёккер. — Электрон. дан. — Москва : Техносфера, 2009. — 528 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/73013>. — Загл. с экрана.
2. 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. — <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>.
3. 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:

4. Салихов, Р.Б. Атомная физика [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Р.Б. Салихов; Башкирский государственный педагогический университет. — Уфа: БГПУ, 2007. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ возможен через Электронную библиотеку БашГУ. — <URL: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

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения дисциплин (модулей).

Электронно-библиотечная система (электронная библиотека) и электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивают одновременный доступ более 25% обучающихся по данному направлению подготовки.

Студенты имеют возможность доступа к фондам учебно-методической документации, библиографическим и реферативным базам данных, электронным библиотечным системам («Электронный читальный зал», «Университетская библиотека онлайн», «Лань» по дисциплинам естественнонаучного направления), к электронному каталогу библиотеки и Интернет-ресурсам (базы данных российских библиотек, полнотекстовые базы данных: каталог авторефератов и диссертаций РГБ, научная электронная библиотека «eLibrary», онлайн база данных «Polpred», патентная база данных «Questel», мультидисциплинарный журнал «Science» и мультидисциплинарный ресурс «AnnualReviews» и др.). Вся необходимая учебно-методическая документация для студентов размещена на сайте вуза, доступ – по IP адресам локальной сети вуза.

Для контроля знаний, умений и навыков студентов в соответствии с выше обозначенными компетенциями на всех стадиях изучения дисциплины разработан дистанционный курс «Основы вычислительной химии», который расположен по адресу: <http://sdo.bashedu.ru/course/view.php?id=1936>.

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

| Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий | Вид занятий | Наименование оборудования, программного обеспечения |
|---|-------------|---|
| 1 | 2 | 3 |
| Химфак корпус, по адресу: 450076, Республика Башкортостан, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, литер В, (учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, для групповых и индивидуальных | Лекции | <ol style="list-style-type: none">1. Мультимедиа-проектор BenQ MX660 (инв. № 410134000000111) (405 ауд.);2. Мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST 2.8 кг (инв. № 410134000000106) (311 ауд.),3. Мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST 2.8 кг (инв. № 410134000000107) (310 ауд.),4. Проектор Mitsubishi XD 490U DLP True XGA 1024*768 3000 ANSI (000001101044092) (305 ауд.),5. Экран настенный Classic Norma 244*183 (инв. № 410134000000138) (405 ауд.), |

| | | |
|---|----------------------------|---|
| <p>консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации):</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ауд. 405, 2. Ауд. 310, 3. Ауд. 311, 4. Ауд. 305 5. ауд. 001, 6. ауд. 002 7. ауд. 006 8. ауд. 007 9. ауд. 008 | | <p>6. Экран настенный Classic на штативе 244*183 с возм.настенного (инв. № 410134000000154) (311 ауд.)</p> |
| <p>Химфак корпус, по адресу: 450076, Республика Башкортостан, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, литер В, Аудитории для проведения лабораторных занятий:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. ауд. 005 (комп. класс) 2. ауд 004 (комп. класс) | <p>Лабораторные работы</p> | <p>На химическом факультете Башкирского государственного университета (при кафедре физической химии и химической экологии) имеется 2 компьютерных класса. Первый компьютерный класс оснащен 13-ю моноблоками на базе двухъядерных процессоров Intel Pentium Dual-Core 3.2 ГГц и оперативной памяти 2Гб. Второй компьютерный класс оснащен 15-ю компьютерами на базе четырехъядерных процессоров Intel Core i5 3.2 ГГц и оперативной памяти 4Гб. Персональные компьютеры обоих классов объединены в одну локальную сеть для обеспечения доступа к научной и методической литературе университета; имеется доступ в сеть интернет. Компьютеры второго класса, помимо офисных нужд, выполняют функцию вычислительного центра. Они объединены в единый вычислительный кластер для обеспечения сотрудникам кафедры, аспирантам и студентам вычислительных мощностей для проведения научных работ. При этом используется некоммерческое программное обеспечение: офисный пакет LibreOffice, Marvin Beans, программа для профессионального построения графиков Gnuplot, пакеты Orca и Firefly для проведения квантово-химических расчетов, NAMD – программа для проведения расчетов молекулярной динамики, программы для визуализации вычислительных экспериментов – ChemCraft lite, VMD, Molden, AutoDock Tools, AutoDock 4.2.5.</p> <p>Дополнительно на кафедре физической химии и химической экологии имеется 18 компьютеров, которые обеспечивают решение различных научно-исследовательских задач в соответствии с направленностью программы.</p> |

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ
дисциплины Строение вещества на 4 семестр
очная форма обучения

| Вид работы | Объем дисциплины |
|---|-------------------------|
| Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов) | 4/144 |
| Учебных часов на контактную работу с преподавателем: | 66,7 |
| лекций | 32 |
| практических/ семинарских | - |
| лабораторных | 34 |
| других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР) | 0,7 |
| Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР) | 77,3 |
| Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль) | - |

Форма(ы) контроля:
Зачет в 4 семестре

| № п /п | Тема и содержание | | | | | | 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.) |
|--------------|---|-----------|--------|--------|--------|--------|---|--|---|
| | | В сего | Л К | Л К | Л К | Л К | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| 1 | Введение. Классическая и квантово-механическая теории строения молекул. | 1 | 2 | – | 2 | 7 | [1-2] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, зачету | лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; презентации |
| 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 | 2 3 | 6 | – | 6 | 13 | [1-2] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, зачету | лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; презентации |

| | | | | | | | | | | |
|---|--|---|---|---|---|---|----|-----------|---|--|
| | <p>электронных пар</p> <p>1.5.2 Молекулы с р-связями.</p> <p>1.6 Закономерности в геометрической конфигурации молекул.</p> <p>1.6.1 Закономерности в равновесных значениях длин связей.</p> <p>1.6.2 Закономерности в валентных углах.</p> <p>1.6.3 Закономерности в углах внутреннего вращения, конформеры.</p> <p>1.6.4 Внутреннее вращение в 1,2-дихлорэтане.</p> | | | | | | | | | |
| 3 | Тема 2. Симметрия молекул. | 1 | 3 | 4 | – | 8 | 15 | [1, 3, 6] | | <p>лабораторные работы;</p> <p>групповые и индивидуальные творческие задания;</p> <p>презентации</p> <p>;</p> <p>коллоквиум;</p> <p>круглый стол;</p> <p>типовой комплект разноуровневых задач</p> |
| 4 | Тема 3. Электрические свойства молекул. 3.1 Дипольные моменты молекул. | | | | | | | [1-3] | Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и | <p>лабораторные работы;</p> <p>групповые и индивидуальные</p> |

| | | | | | | | | | | |
|---|--|------------------|---|---|---|------|----|--|---|---|
| | <p>3.1.1 Электрический дипольный момент в классической теории.</p> <p>3.1.2 Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекул.</p> <p>3.1.3 Дипольный момент и изомерия молекул.</p> <p>3.2 Поляризуемость молекулы.</p> <p>3.3 Связь электрических свойств молекул с электрическими свойствами вещества.</p> <p>3.3.1 Поляризация диэлектриков.</p> <p>3.3.2 Поляризация диэлектрика в переменном поле.</p> <p>3.3.3 Молярная рефракция.</p> | 8.3 ² | 8 | – | 6 | 14.3 | | дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, зачету | е творческие задания; презентации | |
| 5 | <p>Тема 4. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул.</p> <p>4.1 Энергетические состояния двухатомной молекулы.</p> <p>4.2 Статистическое распределение молекул по энергетическим состояниям</p> <p>4.3 Спектральные области.</p> <p>4.4 Вращательные</p> | 6 ² | | | | 12 | 28 | [1-4] | Самостоятельное изучение рекомендованной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к тестированию, контрольной работе, зачету | лабораторные работы; групповые и индивидуальные творческие задания; презентации; контрольные работы; комплект разноуровневых задач; |

| | | | | | | | | |
|---|---------|--------|---|----|------|--|--|------|
| <p>состояния молекул.</p> <p>4.4.1 Двухатомная молекула как жесткий ротатор.</p> <p>4.4.2 Нежесткий ротатор.</p> <p>4.5 Колебательные состояния.</p> <p>4.5.1 Гармонический осциллятор.</p> <p>4.5.2 Ангармонический осциллятор.</p> <p>4.5.4. Взаимодействие вращений и колебаний.</p> <p>4.5.3 Колебательно – вращательные переходы в двухатомной молекуле.</p> <p>4.6 Спектроскопия комбинационного рассеяния.</p> <p>4.6.1 Квантовый подход к КР.</p> <p>4.6.2 Вращательные спектры комбинационного рассеяния линейных молекул.</p> <p>4.6.3. Колебательные спектры КР.</p> <p>4.7 Электронные спектры двухатомных молекул.</p> <p>4.7.1 Интенсивность электронно-колебательных спектров: принцип Франка-Кондона.</p> | | | | | | | | тест |
| Всего часов: | 1 44 | 3 2 | – | 34 | 77,3 | | | |

Рейтинг – план дисциплины

Б1.Б.08 Строение вещества
 направление/специальность 04.05.01. Фундаментальная и прикладная химия
 курс 2, семестр 4

| 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 (по практике) | 10,00 | 1 | 0 | 10,00 |
| Модуль 2 | | | | |
| Текущий контроль | | | | |
| 1. Решение типовых задач | 1,00 | 10 | 0 | 10,00 |
| 2. Выполнение лабораторных работ | 5,00 | 4 | 0 | 20,00 |
| 3. Групповые и индивидуальные творческие задания | 5 | 1 | 0 | 5,00 |
| Рубежный контроль | | | | |
| 1. Письменная контрольная работа (по практике) | 10,00 | 1 | 0 | 10,00 |
| 3. Тест | 30 | 1 | 0 | 30,00 |
| Посещаемость | | | | |
| 1. Посещение лекционных занятий | | | 0 | -6,00 |
| 2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий | | | 0 | -10,00 |
| | | | Итого | 100 |
| 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 |