

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра теоретической физики

Авторы-составители: **Кадыров Дальво Ибрагимович
Ощепков Александр Юрьевич
Хеннер Виктор Карлович**

Рабочая программа дисциплины

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Код УМК 51004

Утверждено
Протокол №6
от «08» июня 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Строение вещества

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **04.03.01** Химия

направленность Программа широкого профиля

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Строение вещества** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.03.01 Химия (направленность : Программа широкого профиля)

ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области

ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.03.01 Химия (направленность: Программа широкого профиля)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	10
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	42
Проведение лекционных занятий	28
Проведение практических занятий, семинаров	14
Самостоятельная работа (ак.час.)	66
Формы текущего контроля	Входное тестирование (1) Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (2)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (10 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Строение вещества. Первый семестр

Введение

Квантовые свойства микрообъектов, суперпозиционные состояния. Задача двух частиц с кулоновским взаимодействием в квантовой механике, сферические и параболические координаты. Свойства водородоподобных атомов: уровни энергии, классификация и формы атомных орбиталей, размеры атомов.

Методы теории возмущений

Применение теории возмущений для описания свойств атома гелия (учет энергии межэлектронного отталкивания) и для исследования поляризации атомов во внешнем электрическом поле (эффект Штарка). Применение вариационного принципа для расчета энергии ионизации и полной электронной волновой функции атома гелия.

Метод самосогласованного поля Хартри: гамильтониан многоэлектронного атома, уравнения Хартри, приближение центрального поля.

Спин. Периодический закон.

Спин электрона: опыт Штерна и Герлаха, спин-орбиталь, тождественность частиц, антисимметричность фермионной волновой функции, принцип запрета Паули для электронов. Определители Слэтера, обменное взаимодействие. Уравнения Хартри-Фока, теорема Купманса.

Свойства многоэлектронных атомов: порядок следования энергетических уровней (правило $n+1$), заполнение электронных оболочек, правила Хунда. Периодичность свойств атомов, периодическая система элементов. Термы многоэлектронных атомов. Валентность и спин.

Построение атомных и молекулярных орбиталей

Теория гибридизации атомных орбиталей: понятие ГАО, углы между sp -гибридными орбиталями, порядок построения ГАО, примеры.

Применение вариационного метода Ритца для расчета молекулярных орбиталей. Свойства иона H_2^+ , уровни энергии, расчет МО, связывающие и разрыхляющие МО.

Нахождение молекулярных орбиталей как линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Адиабатическое приближение (Борн-Оппенгеймер) для молекул. Уравнения Рутаана. Молекула H_2 в МО ЛКАО. Метод валентных связей. Метод конфигурационного взаимодействия. Классификация молекулярных орбиталей гомоядерных двухатомных молекул. Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул, дипольные моменты молекул.

Полуэмпирические методы

Полуэмпирические методы расчета молекул (NDO, NDDO, CNDO, INDO, MINDO). Уравнения Паризерра-Парра-Поппла. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля, примеры расчета, циклические углеводороды, альтернантные и неальтернантные углеводороды.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. учебное пособие для студентов физических специальностей университетов : в 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория)/Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; ред. Л. П. Питаевский. -5-е изд., стер..-Москва:ФИЗМАТЛИТ,2004, ISBN 5-9221-0530-2.-800
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 496 с. : цв. ил. — (Учебник для высшей школы). — ISBN 978-5-9963-0080-8. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система БиблиоТех : [сайт]. <https://psu.bibliotech.ru/Reader/Book/8633>

Дополнительная:

1. Кукушкин А. К. Задачи по квантовой химии и строению молекул/А. К. Кукушкин.- Москва:Издательство Московского университета,1987.-1543.-Библиогр.: с. 156
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебник и практикум для академического бакалавриата / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2017. — 555 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-03128-7. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/402514>
3. Химическая связь. Метод валентных связей : методические указания / составители С. В. Борисевич [и др.], под редакцией А. М. Кузнецов, Л. Г. Шевчук. — Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2016. — 24 с. — ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/63540.html>

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<http://library.psu.ru/node/738> Ресурсы Научной библиотеки ПГНИУ

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Строение вещества** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.
- Интернет-сервисы и электронные ресурсы (поисковые системы, электронная почта и т.д.)

Перечень необходимого лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения:

- приложение, позволяющее просматривать PDF-файлы
- офисный пакет приложений «LibreOffice».

Дополнительный перечень используемых информационных технологий и программного обеспечения определяется преподавателями дисциплины.

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (student.psu.ru).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

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

Для лекционных занятий требуется аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Для проведения практических занятий - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Для групповых (индивидуальных) консультаций - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Для проведения текущего контроля - аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.

Самостоятельная работа студентов: аудитория, оснащенная компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», с обеспеченным доступом в электронную информационно-

образовательную среду университета, помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Строение вещества**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции и
критерии их оценивания**

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий</p>	<p>Знать: базовые положения квантовой механики и фундаментальные основания методов расчёта электронных оболочек, а также вытекающие из них свойства микроскопических составляющих вещества. Уметь: вычислять энергетические уровни электронов, спектры атомов и молекул с применением метода Хартри–Фока, метода валентных связей, метода молекулярных орбиталей. Владеть: основными методами расчёта электронных оболочек многоэлектронных атомов и молекул, навыками проведения указанных расчетов для конкретных молекул и атомов.</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Не знает: базовые положения квантовой механики и фундаментальные основания методов расчёта электронных оболочек, а также вытекающие из них свойства микроскопических составляющих вещества. Не умеет: вычислять энергетические уровни электронов, спектры атомов и молекул с применением метода Хартри–Фока, метода валентных связей, метода молекулярных орбиталей. Не владеет: основными методами расчёта электронных оболочек многоэлектронных атомов и молекул, навыками проведения указанных расчетов для конкретных молекул и атомов.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Общие, но не структурированные знания базовых положений квантовой механики и фундаментальных оснований методов расчёта электронных оболочек, а также вытекающих из них свойства микроскопических составляющих вещества. Демонстрирует частично сформированное умение вычислять энергетические уровни электронов, спектры атомов и молекул с применением метода Хартри–Фока, метода валентных связей, метода молекулярных орбиталей. Имеет представление об основных методах расчёта электронных оболочек многоэлектронных атомов и молекул.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания базовых положений квантовой механики и фундаментальных оснований методов расчёта электронных</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>оболочек, а также вытекающих из них свойства микроскопических составляющих вещества. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы умения вычислять энергетические уровни электронов, спектры атомов и молекул с применением метода Хартри–Фока, метода валентных связей, метода молекулярных орбиталей. В целом успешно, но с отдельными пробелами владеет методами расчёта электронных оболочек многоэлектронных атомов и молекул, навыками проведения указанных расчетов для конкретных молекул и атомов.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Сформированные систематические знания базовых положений квантовой механики и фундаментальных оснований методов расчёта электронных оболочек, а также вытекающих из них свойства микроскопических составляющих вещества. Сформированное умение вычислять энергетические уровни электронов, спектры атомов и молекул с применением метода Хартри–Фока, метода валентных связей, метода молекулярных орбиталей. Успешное и систематическое применение навыков проведения указанных расчетов для конкретных молекул и атомов.</p>
<p>ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области</p>	<p>Знать принципы использования теории возмущений для описания свойств многоэлектронных систем, систем во внешних полях. Уметь строить одноэлектронное приближение в рамках методов самосогласованного поля. Владеть навыками расчета энергии ионизации и полной электронной волновой функции под влиянием возмущений.</p>	<p style="text-align: center;">Неудовлетворител</p> <p>Не знает принципы использования теории возмущений для описания свойств многоэлектронных систем, систем во внешних полях. Не умеет строить одноэлектронное приближение в рамках методов самосогласованного поля. Не владеет навыками расчета энергии ионизации и полной электронной волновой функции под влиянием возмущений.</p> <p style="text-align: center;">Удовлетворительн</p> <p>Общие, но не структурированные знания принципов использования теории возмущений для описания свойств многоэлектронных систем, систем во</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Удовлетворительн</p> <p>внешних полях. Демонстрирует частично сформированное умение строить одноэлектронное приближение в рамках методов самосогласованного поля. Имеет представление о приемах расчета энергии ионизации и полной электронной волновой функции под влиянием возмущений.</p> <p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания принципов использования теории возмущений для описания свойств многоэлектронных систем, систем во внешних полях. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы умения строить одноэлектронное приближение в рамках методов самосогласованного поля. В целом успешно, но с отдельными пробелами владеет приемами расчета энергии ионизации и полной электронной волновой функции под влиянием возмущений.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Сформированные систематические знания принципов использования теории возмущений для описания свойств многоэлектронных систем, систем во внешних полях. Сформированное умение строить одноэлектронное приближение в рамках методов самосогласованного поля. Успешное и систематическое применение приемов расчета энергии ионизации и полной электронной волновой функции под влиянием возмущений.</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : СУОС

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 43 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 43 балла

Компетенция	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
Входной контроль	Введение Входное тестирование	Знание основ квантовой механики
ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области	Методы теории возмущений Письменное контрольное мероприятие	Методы стационарной теории возмущений. Вариационные методы. Метод самосогласованного поля.
ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий	Построение атомных и молекулярных орбиталей Письменное контрольное мероприятие	Теория спинового момента. Многоэлектронные атомы. Периодическая система элементов. Гибридизация атомных орбиталей. Расчет энергии связей.
ПК.3 владеть системой фундаментальных химических понятий	Полуэмпирические методы Итоговое контрольное мероприятие	Полуэмпирические методы расчета энергетических спектров и энергии связи молекул

Спецификация мероприятий текущего контроля

Введение

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **0**

Проходной балл: **0**

Показатели оценивания	Баллы
-----------------------	-------

Умение решать простейшие задачи квантовой физики	5
Знание основ атомной модели строения вещества	5

Методы теории возмущений

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

Показатели оценивания	Баллы
Стационарная теория возмущений для невырожденного случая	8
Методы самосогласованного поля.	6
Стационарная теория возмущений для вырожденного случая	6
Метод Хартри	5
Вариационный метод Ритца	5

Построение атомных и молекулярных орбиталей

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

Показатели оценивания	Баллы
Спин электрона. Принцип Паули	8
Валентность и спин. Правила заполнения электронных оболочек. Периодический закон	7
Ион H_2^+ . Уровни энергии, расчет МО	5
Линейная комбинация атомных орбиталей. Связывающие и разрыхляющие МО	5
Классификация молекулярных орбиталей	5

Полуэмпирические методы

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **17**

Показатели оценивания	Баллы
Полуэмпирические методы расчета молекул	10
Метод молекулярных орбиталей Хюккеля	10
Примеры расчета циклических углеводородов	7
Примеры расчета альтернантных и неальтернантных углеводородов	7
Уравнения Паризерра-Парра-Попла	6