

**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 « С.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Специальность: **04.05.01** Фундаментальная и прикладная химия  
направленность Программа широкого профиля

### **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

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

**04.05.01** Фундаментальная и прикладная химия (направленность : Программа широкого профиля)

**ПК.9** Владеет системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания, важнейшими сведениями по истории химии

#### **Индикаторы**

**ПК.9.1** Использует фундаментальные химические понятия и методологические аспекты химии, формы и методы научного познания в профессиональной деятельности

#### 4. Объем и содержание дисциплины

<b>Направления подготовки</b>	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность: Программа широкого профиля)
<b>форма обучения</b>	очная
<b>№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины</b>	5
<b>Объем дисциплины (з.е.)</b>	3
<b>Объем дисциплины (ак.час.)</b>	108
<b>Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:</b>	42
<b>Проведение лекционных занятий</b>	28
<b>Проведение практических занятий, семинаров</b>	14
<b>Самостоятельная работа (ак.час.)</b>	66
<b>Формы текущего контроля</b>	Входное тестирование (1) Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (2)
<b>Формы промежуточной аттестации</b>	Зачет (5 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://bibliotech.psu.ru/Reader/Book/8633>

### Дополнительная:

1. Кукушкин А. К. Задачи по квантовой химии и строению молекул / А. К. Кукушкин. - Москва: Издательство Московского университета, 1987. - 154 с. - Библиогр.: с. 156
2. 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](http://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.  
Индикаторы и критерии их оценивания**

**ПК.9**

**Владеет системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания, важнейшими сведениями по истории химии**

<b>Компетенция (индикатор)</b>	<b>Планируемые результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания результатов обучения</b>
<p><b>ПК.9.1</b> Использует фундаментальные химические понятия и методологические аспекты химии, формы и методы научного познания в профессиональной деятельности</p>	<p>Знать: базовые положения квантовой механики, а также вытекающие из них свойства микроскопических составляющих вещества. Уметь: вычислять энергетические уровни электронов. Владеть: основными методами расчёта электронных оболочек.</p>	<p align="center"><b>Неудовлетворител</b></p> <p>Не знает: базовые положения квантовой механики, а также вытекающие из них свойства микроскопических составляющих вещества. Не умеет: вычислять энергетические уровни электронов. Не владеет: основными методами теории возмущений.</p> <p align="center"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>Общие, но не структурированные знания базовых положений квантовой механики, а также вытекающих из них свойства микроскопических составляющих вещества. Демонстрирует частично сформированное умение вычислять энергетические уровни электронов. Имеет представление об основных методах теории возмущений.</p> <p align="center"><b>Хорошо</b></p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания базовых положений квантовой механики, а также вытекающих из них свойства микроскопических составляющих вещества. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы умения вычислять энергетические уровни электронов. В целом успешно, но с отдельными пробелами владеет методами теории возмущений.</p> <p align="center"><b>Отлично</b></p> <p>Сформированные систематические знания базовых положений квантовой механики, а также вытекающих из них свойства микроскопических составляющих вещества. Сформированное умение вычислять</p>

<b>Компетенция (индикатор)</b>	<b>Планируемые результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания результатов обучения</b>
		<b>Отлично</b> энергетические уровни электронов. Успешное и систематическое применение методов теории возмущений.

## 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 (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
<b>Входной контроль</b>	Введение <b>Входное тестирование</b>	Знание основ квантовой механики
<b>ПК.9.1</b> Использует фундаментальные химические понятия и методологические аспекты химии, формы и методы научного познания в профессиональной деятельности	Методы теории возмущений <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	Методы стационарной теории возмущений. Вариационные методы. Метод самосогласованного поля.
<b>ПК.9.1</b> Использует фундаментальные химические понятия и методологические аспекты химии, формы и методы научного познания в профессиональной деятельности	Построение атомных и молекулярных орбиталей <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	Теория спинового момента. Многоэлектронные атомы. Периодическая система элементов. Гибридизация атомных орбиталей. Расчет энергии связей.
<b>ПК.9.1</b> Использует фундаментальные химические понятия и методологические аспекты химии, формы и методы научного познания в профессиональной деятельности	Полуэмпирические методы <b>Итоговое контрольное мероприятие</b>	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