Министерство просвещения Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Ульяновский государственный педагогический университет
имени И.Н. Ульянова»
(ФГБОУ ВО «УлГПУ им. И.Н. Ульянова»)

Факультет естественно-географический
Кафедра биологии и химии

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебно-
методической работе
_____ С.Н. Титов
«25» июня 2021 г.

СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ И ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Программа учебной дисциплины Химического модуля

основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы бакалавриата по направлению подготовки
44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки)

направленность (профиль) образовательной программы
Биология.Химия

(очная форма обучения)

Составитель: Кафиятуллина А.Г., к.х.н., доцент кафедры биологии и химии

Рассмотрено и одобрено на заседании ученого совета естественно-географического факультета, протокол от «22» июня 2021 г. №7

Ульяновск, 2021

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат: 01D77C644FC1E54000000006381D0002
Владелец: Титов Сергей Николаевич
Действителен: с 19.07.2021 до 19.07.2022

Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Строение молекул и основы квантовой химии» относится к дисциплинам части формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. Дисциплины (модули) Химического модуля учебного плана основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы бакалавриата по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки), направленность (профиль) образовательной программы «Биология. Химия», очной формы обучения.

Дисциплина опирается на результаты обучения, сформированные в рамках дисциплин учебного плана, изученных обучающимися в 1-9 семестрах: Общая и неорганическая химия, Физическая и коллоидная химия, Аналитическая химия, Органическая химия, Химия высокомолекулярных соединений, Теория и методика преподавания химии, Физико-химические методы исследований, Химия комплексных соединений.

Результаты изучения дисциплины «Строение молекул и основы квантовых химии» являются теоретической и методологической основой для изучения дисциплин: Производственная (педагогическая) преподавательская по 2 профилю, Производственная (научно-исследовательская работа) Преддипломная практика.

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

Целью освоения дисциплины «Строение молекул и основы квантовой химии» является:

формирование основных теоретических представлений о структуре вещества в современном мире.

В результате освоения программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии» (в таблице представлено соотнесение образовательных результатов обучения по дисциплине с индикаторами достижения компетенций):

Компетенция и индикаторы ее достижения в дисциплине	Образовательные результаты дисциплины (этапы формирования дисциплины)		
	знает	умеет	владеет
Способен использовать теоретические и практические знания для постановки и решения исследовательских задач в предметной области (в соответствии с профилем и уровнем обучения)			

и в области образования (ПК-11)			
Применяет навыки проведения химического эксперимента, основные синтетические и аналитические методы получения и исследования химических веществ и реакций (ПК-11.4)	ОР-1 Основные понятия по химии	ОР-2 уметь применять теоретические знания лекций и семинаров для проведения опытов и экспериментов, для решения расчетных и экспериментальных задач по химии	
использует современную аппаратуру и оборудование для выполнения научно-исследовательских и лабораторных химических работ (ПК-11.5)	ОР-3 современные методы химических исследований;	ОР-4 сопоставлять, обобщать и интерпретировать результаты наблюдений и экспериментальных исследований;	
применяет знания о физических и химических свойствах материалов с целью безопасной постановки химического эксперимента (ПК-11.6)	ОР-5 основные синтетические и аналитические методы получения и исследования химических веществ и реакций	ОР-6 проводить научно-исследовательскую работу в соответствии с индивидуальным планом.	
ПК-12 Способен выделять структурные элементы, входящие в систему познания предметной области (в соответствии с профилем и уровнем обучения), анализировать их в единстве содержания, формы			

и выполняемых функций			
ПК-12.4 устанавливает взаимосвязи между фактами и теорией, причиной и следствием при анализе проблемных ситуаций и обосновании принимаемых решений на основе базовых химических знаний;	ОР-7 теоретические основы основных положений физических и химических наук	ОР-8 использовать углубленные теоретические и практические знания в области химии, часть которых находится на рубеже физико-химических наук	
ПК-15 Способен определять собственную позицию относительно дискуссионных проблем предметной области (в соответствии с профилем и уровнем обучения)			
ПК-15.3 владеет навыками поиска и первичной обработки научной и научно-технической информации в области химии;	ОР-9 основные химические понятия и законы	ОР-10 работать с учебной, учебно-методической и научной литературой в области химии.	
ПК-15.4 осуществляет критический анализ и синтез информации в области химии.	ОР-11 химические законы как теоретическую базу для изучения свойств химических элементов и образованных ими веществ, их распространение в неживой и живой природе,	ОР-12 аргументировано излагать собственное мнение по проблемам химии.	

	принципы ведения дискуссии.		

2. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Номер семестра	Учебные занятия						Форма промежуточной аттестации
	Всего		Лекции, час	Практические занятия, час	Лабораторные занятия, час	Самостоят. работа, час	
	Трудоемк.						
	Зач. ед.	Часы					
10	2	72	12	-	20	40	зачет
Итого:	2	72	12	-	20	40	зачет

3. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

3.1.Указание тем (разделов) и отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий, оформленных в виде таблицы:

Наименование раздела и тем	Количество часов по формам организации обучения			
	Лекц. занятия	Лаб. занятия	Практ. занятия	Самост. работа
Введение в предмет	1			2
Раздел 1. Строение атома Тема 1.Начала квантовой механики	2	4	-	8
Тема 2. Периодический закон и Периодическая система элементов Д. И. Менделеева.	1	2		4
Раздел II. Молекула. Химическая связь Тема 4. Ковалентная связь. Метод валентных связей	2	4		8
Тема 5. Метод молекулярных орбиталей	2	2		4
Тема 6. Химическая связь в комплексных соединениях.	2	2		4
Тема 6. Невалентные силы сцепления.	1	2		4
Раздел III. Конденсированное состояние. **Тема. 7. Конденсированное состояние.**	1	4	-	8
ИТОГО	**12**	**20**	**-**	**40**

3.2.Краткое описание содержания тем (разделов) дисциплины

Введение в предмет

Определение термина «строение вещества». Использование данных о строении вещества в современной науке и технике. Классическая теория химического строения.

Интерактивная форма: групповое обсуждение.

Раздел 1. Строение атома

Тема 1. Начала квантовой механики

Экспериментальные доказательства сложности строения атома.Открытие законов электролиза, катодных лучей, фотоэффекта, радиоактивности, электрона. История развития представлений о строении атома. Модель атома Томсона. Опыты Резерфорда. Модель атома Н. Бора.

Принципы квантовой механики: квантовый характер энергетических изменений, двойственное корпускулярно-волновое поведение, принцип неопределенности Гейзенберга. Уравнение Шредингера. Квантовые числа.

Многоэлектронные атомы. Принципы заполнения атомных орбиталей: принцип наименьшей энергии, Принцип Паули, Правило Хунда, Правило Клечковского. Последовательность заполнения атомных орбиталей.

Свойства атома: потенциал ионизации, сродство к электрону, размер атомов, электроотрицательность, координационное число, валентность, степень окисления

Интерактивная форма:учебная дискуссия по теме принципы квантовой механики.

Тема 2. Периодический закон и Периодическая система элементов Д. И. Менделеева.

Современная формулировка периодического закона. Периодические изменения радиуса атома, энергии ионизации, сродства к электрону, электроотрицательности. Объяснение периодического закона с точки зрения строения атома. s, p, d, f- элементы. Научное значение периодического закона. Открытия новых элементов. Устойчивость элементов.

Интерактивная форма: групповое обсуждение.

Раздел II. Молекула. Химическая связь

Общие сведения о химической связи.История развития представлений о химической связи и валентности. Основные характеристики химической связи: длина, направленность, прочность, валентные углы. Расчет средней энергии связи. Физические методы определения структуры молекул: электронография, рентгеноструктурный анализ, радиоспектроскопия.

Тема 3. Ковалентная связь.Метод валентных связей

Квантово-химическое объяснение ковалентной связи. Метод валентных связей. Сигма-, пи- и дельта- связи. Использование концепции гибридизованных атомных орбиталей для трактовки образования химических связей в молекулах. Локализованные орбитали и описание молекул в рамках валентных связей (схем). Метод Гиллеспи

Интерактивная форма: групповое обсуждение.

Тема 4. Метод молекулярных орбиталей

Электронное уравнение Шредингера для молекулы. Метод молекулярных орбиталей (ММО). Представление МО в виде линейных комбинаций АО. Молекулярные диаграммы распределения электронной плотности. Порядки связей. Магнитные свойства молекул. Связь метода МО с методом валентных связей.

Интерактивная форма: Групповое обсуждение.

Тема 5.Химическая связь в комплексных соединениях.

Комплексные соединения. Координационная теория Вернера. Роль комплексов в биологии. Классификация комплексных соединений. Объяснение химической связи в комплексах на основании электростатических представлений. Квантово-химические методы трактовки химической связи в комплексных соединениях: метод валентных связей, теория кристаллического поля, молекулярные орбитали в комплексных соединениях, теория поля лигандов.

Интерактивная форма: Групповое обсуждение.

Тема 6. Невалентные силы сцепления.

Невалентные силы сцепления. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь, силы Ва-дер-Ваальса

Интерактивная форма: Групповое обсуждение.

Раздел III. Конденсированное состояние.

Тема. 9. Конденсированное состояние.

Кристаллическое состояние.Агрегатное состояние. Кристаллическое состояние. Анизотропия. Кристаллическая решетка. Молекулярные, атомные, ионные кристаллы.

Жидкое состояние.Жидкое состояние вещества. Строение жидкостей. Строение жидкой воды. Растворы электролитов. Аморфное состояние.

Интерактивная форма: Групповое обсуждение.

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

Самостоятельная работа студентов является особой формой организации учебного процесса, представляющая собой планируемую, познавательно, организационно и методически направляемую деятельность студентов, ориентированную на достижение конкретного результата, осуществляемую без прямой помощи преподавателя. Самостоятельная работа студентов является составной частью учебной работы и имеет целью закрепление и углубление полученных знаний и навыков, поиск и приобретение новых знаний, а также выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям и экзамену. Она предусматривает, как правило, разработку рефератов, написание докладов, выполнение творческих, индивидуальных заданий в соответствии с учебной программой (тематическим планом изучения дисциплины). Тема для такого выступления может быть предложена преподавателем или избрана самим студентом, но материал выступления не должен дублировать лекционный материал. Реферативный материал служит дополнительной информацией для работы на практических занятиях. Основная цель данного вида работы состоит в обучении студентов методам самостоятельной работы с учебным материалом. Для полноты усвоения тем, вынесенных в практические занятия, требуется работа с первоисточниками. Курс предусматривает самостоятельную работу студентов со специальной литературой. Следует отметить, что самостоятельная работа студентов результативна лишь тогда, когда она выполняется систематически, планомерно и целенаправленно.

Задания для самостоятельной работы предусматривают использование необходимых терминов и понятий по проблематике курса. Они нацеливают на практическую работу по применению изучаемого материала, поиск библиографического материала и электронных источников информации, иллюстративных материалов. Задания по самостоятельной работе даются по темам, которые требуют дополнительной проработки.

Общий объем самостоятельной работы студентов по дисциплине включает аудиторную и внеаудиторную самостоятельную работу студентов в течение семестра.

Аудиторная самостоятельная работа осуществляется в форме выполнения тестовых заданий, задач, письменных проверочных работ по дисциплине. Аудиторная самостоятельная работа обеспечена базой тестовых материалов, задач по разделам дисциплины.

Внеаудиторная самостоятельная работа осуществляется в формах:

- подготовки к устным докладам (мини-выступлениям);
- подготовка к защите реферата;
- подготовки к защите индивидуальных лабораторных работ.

Контрольная работа (примерный вариант)

1. Напишите электронную формулу элементов со следующими порядковыми номерами 11, 22, 58, 85. И определите по электронной формуле местоположение элемента в периодической таблице.
2. Напишите значения квантовых чисел для всех электронов $_{11}Э$
3. Потенциал ионизации. Как изменяется потенциал ионизации в ряду элементов: Li, Na, K, Rb, Cs?
4. Укажите тип химической связи в веществах: KCl, HBr, O_2, Zn, CaF_2, N_2, NH_3, SO_2, CO, H_2O.
5. Для предложенных молекул укажите тип гибридизации центрального атома, назовите геометрическую форму молекулы и предскажите наличие дипольного момента молекулы и его направление: ClO_3, BeF_2, AsH_3, ClF_3.
6. Определите по методу Гиллеспи геометрическую форму молекул: $AlCl_3$, CO_2, ICl_3,SF_6.
7. Нарисуйте энергетическую диаграмму распределения электронов по молекулярным орбиталям в молекуле O_2.

7.1. Кратность химической связи в молекуле O_2 равна…
7.2. Магнитные свойства молекулы O_2
7.3. Установите порядок увеличения энергии химической связи в частицах O_2^+, O_2^-,O_2.
7.4. Установите порядок увеличения длины химической связи в частицах O_2^+, O_2^-,O_2.

8. Обсудите свойства комплексных ионов $Fe(H_2O)_6^{3+}$и $Fe(CN)_6^{3-}$
9. Приведите примеры веществ с атомной кристаллической решеткой. Какими свойствами обладают эти вещества.
10. Определите структурный тип решетки, в которой кристаллизуется простое вещество (кубическая гранецентрированная, кубическая объемноцентрированная или типа алмаза), используя экспериментальные данные (плотность вещества 3500 кг/м^3 , ребро куба $3{,}57\cdot10^{-10}$*м*), рассчитайте атомный радиус С.

Вопросы для учебной дискуссии
Начала квантовой механики

1. Какие модели строения атома предлагались, кто их авторы, на каких экспериментальных данных они основаны?
2. В чем заключается принцип наименьшей энергии. Что такое атомные спектры и как они получаются?
3. В чем состоит принцип неопределенности Гейзенберга? Какие два важных следствия из него вытекают?
4. Сформулируйте гипотезу де Бройля.
5. Физический смысл квантовых чисел.
6. Запишите электронную конфигурацию He, Ne и Li в основном и первом возбужденном состоянии.
7. Напишите электронную формулу элементов со следующими порядковыми номерами 3, 27, 52, 66 . И определите по электронной формуле местоположение элемента в периодической таблице.
8. Напишите значения квантовых чисел для всех электронов С
9. Руководствуясь ПС, укажите символ химического элемента, нейтральному атому которого отвечает следующая электронная формула: а) $1s^22s^22p^63s^23p^6$
   б)$1s^22s^22p^63s^23p^6\ 4s^23d^5$
10. Что такое энергия ионизации и сродство к электрону? Какие атомы обладают наименьшей и наибольшей энергией ионизации, наибольшим сродством к электрону?
11. Как изменяются радиусы атомов и однотипных ионов в периодах, главных и побочных подгруппах и группах

Групповое обсуждениетемы. Ковалентная связь. Метод валентных связей

1. Энергия связей H-H, F-F и H-F соответственно равны: 436, 153 и 563 кДж/моль. Сколько теплоты выделится при взаимодействии водорода со фтором, если они взяты количеством вещества 1 моль каждый?
2. Какая энергия должна быть затрачена на разложение HI массой 0,64 г, если $E_{дис}(HI)$ = 298,4 кДж/моль?. Будет ли разлагаться HI действием УФ- излучения (дл.волны= $2 \cdot 10^{-7}$ м)
3. Чему равна средняя энергия связи N-H, если реакция синтеза NH_3 идет с выделением теплоты 46,2 кДж/моль, а диссоциация молекул N_2 и H_2 соответственно равны 942 и 432 кДж/моль? (ответ: 388,4 кДж/моль).
4. Оцените длину связи HBr в молекуле, если l(H-H) =0,074 нм, а l(Br-Br) =0,288 нм.
5. По данным спектроскопического эксперимента межъядерные расстояния в молекуле BI_3 равны: r (B-I) = 0,210 нм, r(I-I) = 0,364 нм. Определите, какую геометрическую фигуру образуют ядра атомов в этой молекуле. Установите тип гибридизации центрального атома.
6. Длина диполя молекулы фосфина равна $1{,}125 \cdot 10^{-2}$нм. Рассчитайте дипольный момент молекулы фосфина в Кл·м и в Дебаях.
7. Длина диполей молекул H_2S и NH_3 равны соответственно 0,019 и 0,0308 нм. Какая из молекул более полярна?
8. Чему равна длина диполя молекул H_2O и NH_3, если их моменты выражаются соответственно величинами: $6{,}19 \cdot 10^{-30}$ и $4{,}8 \cdot 10^{-30}$Кл·м(ответ $3{,}8 \cdot 10^{-19}$ и $3{,}0 \cdot 10^{-11}$м)
9. Как должны меняться значения моментов диполей молекул в ряду: а) ClF-BrF-IF; б)NH_3-PH_3-AsH_3?Покажите также рисунком, почему векторная сумма диполей связей оказывается различной для двух трехатомных молекул CO_2 и H_2O.
10. Изоэлектронные молекулы (молекулы, имеющие одинаковое число электронов) обладают близкими характеристиками межмолекулярного взаимодействия, параметрами химической связи. В таблице приведены значения, характеризующие химическую связь и межмолекулярное взаимодействие для O_2, N_2, NO и CO.

	1	2	3	4
Энергия связи, кДж/моль	945,3	1076,4	631,6	493,6
Длина связи, нм	0,1098	0,1282	0,1151	0,1207
Дипольный момент, Д	0	0,11	0,16	0
Т кип, ^{0}C	-195,8	-191,5	-151,7	-182,97
Т пл. ^{0}C	-210	-205	-163,7	-218,8

а) Определите какому из веществ (O_2, N_2, NO и CO) соответствуют данные столбика 1-4 (укажите, на основе каких данных Вы сделали это отнесение).

б) Какие из приведенных молекул являются изоэлектронными?

в) Определите кратность связи в молекулах (O_2, N_2, NO и CO).

г) Приведите по одному примеру реакций лабораторного получения O_2, N_2, NO и CO.

11.Покажите схемами два возможных механизма образования ковалентной связи.

12. Какие элементы 2-го периода могут быть донорами и акцепторами электронных пар? Чем это определяется? Возможна ли донорная или акцепторная функция для центрального атома в молекулах: BeF_2,BF_3,CF_4, NH_3, H_2O, PCl_5?

13.Изображая перекрывание электронных облаков, покажите образование σ –связи в молекулах H_2, Cl_2, HCl.

14. Сколько σ и π – связей в молекулах C_2H_2 и CO_2?

15.Приведите примеры молекул, которые содержат: а) только σ- связи; б) одну σ- и одну π-связи; в) две σ- и одну π-связи; г) две σ и две π- связи; д) одну σ- и две π- связи; е) три σ- и одну π- связи. Сколько σ и π-связей содержат молекулы: SF_6, CCl_4, SO_3, PCl_5, $POCl_3$, C_2H_4, C_2H_2, $COCl_2$, SO_2Cl_2?

16. Сколько химических связей содержится в молекуле гептана? Сколько из них связей С-С и С-Н?

17. .Составьте валентные схемы для молекул: N_2, CO_2, PH_3, HOCl, N_2O, NO, N_2O_3, NO_2, N_2O_5.

18. Обоснуйте пространственную структуру следующих молекул: $COCl_2$, $SOCl_2$, $ZnCl_2$, PF_5, SO_3, CO_3^{2-}.

Групповое обсуждение Метода молекулярных орбиталей

Представление МО в виде линейных комбинаций АО. Правила заполнения молекулярных орбиталей.Молекулярные диаграммы распределения электронной плотности. Порядки связей. Магнитные свойства молекул. Связь метода МО с методом валентных связей.

Используя метод ЛКАО объясните возникновение и особенности связи в молекулах B_2, C_2, N_2, F_2.

Письменная работа

Нарисуйте энергетическую диаграмму распределения электронов по молекулярным орбиталям в молекуле O_2.

1.1. Согласно методу МО кратность химической связи в молекуле O_2 равна…

1.2. Какими магнитными свойствами обладает молекула O_2

1.3. Используя метод МО установите порядок увеличения энергии химической связи в частицах O_2^+, O_2^-,O_2.

Используя метод МО установите порядок увеличения длины химической связи в частицах O_2^+, O_2^-,O_2.

Групповое обсуждение темы. Химическая связь в комплексных соединениях.

1. Обсудите с помощью теории ВС комплексы $[Zn(NH_3)_4]^{2+}$,$[Cu(NH_3)_2]^+$
2. Определить пространственную структуру и устойчивость комплексных ионов: а) парамагнитного $[CoF_6]^{3-}$ и б) диамагнитного $[Co(NH_3)_6]^{3+}$.
3. Рассмотрите с помощью теории ВС и ТКП комплексы $[FeF_6]^{3-}$ и $[Fe(CN)_6]^{3-}$.
4. Ионы Al^{3+}, Zn^{2+} и Co^{2+} находятся в октаэдрическом окружении лигандов. Какой из этих ионов может поглощать видимый свет и вследствие этого представляется нам окрашенным

Групповое обсуждение темы. Конденсированное состояние.

Кристаллическое состояние.Агрегатное состояние. Кристаллическое состояние. Анизотропия. Кристаллическая решетка. Молекулярные, атомные, ионные кристаллы.

Жидкое состояние.Жидкое состояние вещества. Строение жидкостей. Строение жидкой воды. Растворы электролитов. Аморфное состояние.

Темы докладов

1. Основные положения классической теории строения химических соединений.
2. Строение атома. Сложность структуры атома. Модели строения атома по Томпсону, Резерфорду, Бору. Спектры атомов

3. Квантовая химия. Волны и уравнения де Бройля. Принцип неопределенности Гейзенберга.
4. Уравнение Шредингера. Физический смысл квантовых чисел. Энергетические уровни, подуровни, орбитали. Их число, форма и их электронная ёмкость.
5. Строение атомного ядра. Состав, структура и устойчивость ядра. Естественная и искусственная радиоактивность. Изотопы, изобары, изотоны.
6. Периодический закон и периодическая система химических элементов Д.И.Менделеева. Структуры атомов в малых и больших периодах в главных и побочных подгруппах.
7. Метод ВС. Типы химической связи по методу ВС. Механизм образования связи и структуры молекул. Реальная и максимальная валентность. Сравнительное сопоставление ковалентной и ионной связи. Делокализованные многоцентровые связи. Гибридизация атомных орбиталей. Типы гибридизации. Склонность к гибридизации в периодах и подгруппах.
8. Метод МО. Структуры молекул(энергетическая диаграмма). Формы орбиталей и порядок их заполнения. Порядок химической связи.
9. Основные положения теории кристаллического поля.
10. Газовые законы Бойля-Мариотта, Шарля, Гей-Люссака, Авогадро, Дальтона и уравнения состояния идеальных газов Клапейрона и Менделеева – Клапейрона.
11. Строение веществ в жидком состоянии.
12. Строение и свойства кристаллических веществ.

Для самостоятельной подготовки к занятиям по дисциплине рекомендуется использовать учебно-методические материалы:

1. Кафиятуллина А.Г. Общая химия: Учебное пособие. – Ульяновск: УлГПУ, 2015. – 73 с.
2. Кафиятуллина А.Г., Прокопенко И.В. Неорганическая химия: учебно-методическое пособие для направления подготовки бакалавров 44.03.01, 44.03.05 Педагогическое образование Профиль: Биология. Химия (очная форма обучения). / Кафиятуллина А.Г., Прокопенко И.В. – Ульяновск: ФГБОУ ВО «УлГПУ им. И.Н. Ульянова», 2017. – 49 с.
3. Кафиятуллина А.Г. Химия высокомолекулярных соединений: учебно-методическое пособие для направления подготовки бакалавров 44.03.01, 44.03.05 Педагогическое образование Профиль: Биология. Химия (очная форма обучения). / Кафиятуллина А.Г. – Ульяновск: ФГБОУ ВО «УлГПУ им. И.Н. Ульянова», 2017. – 28 с.

5. Примерные оценочные материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Организация и проведение аттестации студента

ФГОС ВО в соответствии с принципами Болонского процесса ориентированы преимущественно не на сообщение обучающемуся комплекса теоретических знаний, но на выработку у бакалавра компетенций – динамического набора знаний, умений, навыков и личностных качеств, которые позволят выпускнику стать конкурентоспособным на рынке труда и успешно профессионально реализовываться.

В процессе оценки бакалавров необходимо используются как традиционные, так и инновационные типы, виды и формы контроля. При этом постепенно традиционные средства совершенствуются в русле компетентностного подхода, а инновационные средства адаптированы для повсеместного применения в российской вузовской практике.

Цель проведения аттестации – проверка освоения образовательной программы дисциплины-практикума через сформированность образовательных результатов.

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины; помогает оценить крупные совокупности знаний и умений, формирование определенных компетенций.

Оценочными средствами текущего оценивания являются: доклад, тесты по теоретическим вопросам дисциплины, защита практических работ и т.п. Контроль усвоения материала ведется регулярно в течение всего семестра на практических (семинарских, лабораторных) занятиях.

№ п/п	**СРЕДСТВА ОЦЕНИВАНИЯ,** используемые для текущего оценивания показателя формирования компетенции	Образовательные результаты дисциплины
	Оценочные средства для текущей аттестации ОС-1 Контрольная работа ОС-2 Учебная дискуссия ОС-3 Устный опрос ОС-4 Доклад с презентацией	ОР-1 Основные понятия по химии ОР-2 уметь применять теоретические знания лекций и семинаров для проведения опытов и экспериментов, для решения расчетных и экспериментальных задач по химии ОР-3 современные методы химических исследований; ОР-4 сопоставлять, обобщать и интерпретировать результаты наблюдений и экспериментальных исследований; ОР-5 основные синтетические и аналитические методы получения и исследования химических веществ и реакций ОР-6 проводить научно-исследовательскую работу в соответствии с индивидуальным планом. ОР-7 теоретические основы основных положений физических и химических наук ОР-8 использовать углубленные теоретические и практические знания в области химии, часть которых находится на рубеже физико-химических наук ОР-9 основные химические понятия и
	Оценочные средства для промежуточной аттестации **зачет (экзамен)** ОС-5 Зачет в форме устного собеседования	

		законы ОР-10 работать с учебной, учебно-методической и научной литературой в области химии. ОР-11 химические законы как теоретическую базу для изучения свойств химических элементов и образованных ими веществ, их распространение в неживой и живой природе, принципы ведения диск ОР-12 аргументировано излагать собственное мнение по проблемам химии.

Описание оценочных средств и необходимого оборудования (демонстрационного материала), а так же процедуры и критерии оценивания индикаторов достижения компетенций на различных этапах их формирования в процессе освоения образовательной программы представлены в Фонде оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине «Строение молекул и основы квантовой химии».

Оценочными средствами текущего оценивания являются: устные доклады, защита реферата, итоговой и текущих практических работ, тест по теоретическим вопросам дисциплины. Контроль усвоения материала ведется на лабораторных занятиях регулярно в течение всего семестра.

Материалы, используемые для текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине

Материалы для организации текущей аттестации представлены в п.4 программы.

ОС-1 Контрольная работа

Контрольная работа проводится в письменной форме. Структурными элементами контрольной работы являются тестовые задания и практическая часть (решение задач). (образец варианта контрольной работы приведен в п.4 программы).

ОС-2 Учебная дискуссия

Вопросы к учебной дискуссии приведены в п.4 программы.

ОС-3 Устный опрос

Вопросы к устным опросам по темам приведены в п.4 программы.

ОС-4 Доклад с презентацией

Материалы, используемые для промежуточного контроля успеваемости обучающихся по дисциплине

ОС-5 Зачет

При проведении зачета учитывается уровень знаний обучающегося при ответах на вопросы (теоретический этап формирования компетенций), умение обучающегося применять теоретические знания на практике и по выполнению обучающимся заданий текущего контроля (модельный этап формирования компетенций). Экзаменационный билет содержит один теоретический вопрос и один практический (решение задачи).

Итоговая аттестация

Итоговая аттестация осуществляется в конце 10 семестра в форме зачета. Аттестационные испытания проводятся преподавателем, ведущим лекционные занятия по данной дисциплине. Присутствие посторонних лиц в ходе проведения аттестационных испытаний без разрешения ректора или проректора не допускается (за исключением работников университета, выполняющих контролирующие функции в соответствии со своими должностными обязанностями). В случае отсутствия ведущего преподавателя аттестационные испытания проводятся преподавателем, назначенным письменным распоряжением по кафедре (структурному подразделению). Во время аттестационных испытаний бакалавры могут пользоваться программой учебной дисциплины. Время подготовки ответа при сдаче экзамена в устной форме должно составлять не менее 40 минут (по желанию обучающегося ответ может быть досрочным). Время ответа - не более 15 минут.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Основные понятия химии. Атом. Нуклоны. Химический элемент. Изотопы.
2. Атомно-молекулярное учение, его основные положения. Роль М.В. Ломоносова в создании основ атомно-молекулярного учения.
3. Факты, свидетельствующие о сложном составе атомов.
4. Первые модели строения атома. (Модель Томпсона, Резерфорда, Бора)
5. Основные принципы квантовой химии. Области применения и назначение квантовой химии.
6. Уравнение Шредингера. Квантовые числа.
7. Порядок заполнения электронных орбиталей в атоме. Принцип наименьшей энергии, Паули, правило Гунда.
8. Правила заполнения электронами атомных орбиталей
9. Энергия ионизации элемента. Изменение энергии ионизации с ростом заряда ядра атома Z в периоде и группе (главная и побочная подгруппы) и с учётом устойчивых электронных конфигураций.
10. Периодический закон Д.И. Менделеева. Структура Периодической системы и её связь со строением атомов. Электронные семейства *s-, p-, d-* и *f*-элементов, их особенности и положение в Периодической системе.

11. Энергия ионизации и сродство к электрону и их связь с окислительно-восстановительными свойствами атомов химических элементов. Электроотрицательность атомов.

12. Атомный радиус. Изменение радиусов атомов с ростом заряда ядра Z в главных и побочных подгруппах.

13. Характеристики взаимодействующих атомов: орбитальный радиус, ионизационный потенциал, сродство к электрону. Электроотрицательность.

14. Степень окисления элементов в соединениях: отрицательная, положительная, нулевая. Окислительно-восстановительные свойства элементов в зависимости от высшей, низшей, промежуточной степеней окисления. Различия элементов второго и третьего периодов по проявляемой степени окисления на примере кислорода и серы, фтора и хлора.

15. Виды химической связи. σ- и π-Связи. Основные характеристики химической связи (длина, энергия, кратность, валентный угол). Свойства молекул с различным типом связи.

16. Гибридизация атомных орбиталей. Условия, определяющие возможность гибридизации. Основные типы гибридизации с участием *s*-, и *p*-орбиталей и соответствующая им геометрия молекул (привести примеры).

17. Типы химической связи. Ковалентная (полярная и неполярная) связи. Дипольный момент молекулы.

18. Ионная связь. Сходство и различия ковалентной полярной и ионной связей.

19. Основные характеристики ковалентной связи: направленность, насыщаемость. Механизмы образования ковалентной связи. Максимальная валентность (насыщаемость) элементов второго периода в соединениях на примере азота в молекулах азота, аммиака и катионе аммония и сравнение её со степенями окисления азота в этих соединениях.

20. Полярная и неполярная ковалентная связь. Насыщаемость ковалентной связи и различия в ней элементов второго и третьего периодов на примере азота и фосфора, кислорода и серы.

21. Природа и основные свойства ковалентной химической связи с позиций метода валентных связей (МВС). Основные положения МВС. Обменный и донорно-акцепторный механизмы образования ковалентной связи. Валентность с позиций МВС.

22. Строение молекул, с позиций метода валентных связей (МВС). Какова гибридизация центрального атома, типы связей и углы связей в этих соединениях?

23. Теория взаимного отталкивания электронных пар. (Теория Гиллеспи).

24. Основные положения метода молекулярных орбиталей (ММО ЛКАО). Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие орбитали. Строение, кратность связи и магнитные свойства молекул с позиций ММО на примере B_2, C_2 и N_2. Молекулярные ионы.

25. Строение комплексных соединений. ТКП

26. Строение комплексных соединений. ММО.

27. Металлическая связь.

28. Водородная связь. Механизм образования и энергия этой связи. Соединения с водородной связью и элементы их образующие.

В конце изучения дисциплины подводятся итоги работы студентов на лекционных и практических занятиях путем суммирования заработанных баллов в течение семестра.

Критерии оценивания знаний обучающихся по дисциплине

Формирование балльно-рейтинговой оценки работы обучающихся

		Посещение лекций	Посещение практических занятий	Работа на практических занятиях	Зачёт
10 семестр	Разбалловка по видам работ	6 х 1=6 баллов	10 х 1=10 баллов	152 балла	32 балла
	Суммарный макс. балл	6 баллов max	16 баллов max	168 балла max	200 баллов max

Критерии оценивания работы обучающегося по итогам 10 семестра

По результатам 10 семестра, трудоёмкость которого составляет 2 ЗЕ, итоговым контролем является зачёт, для получения которого бакалавру нужно набрать более 100 баллов.

	2 ЗЕ
«зачтено»	более 100
«не зачтено»	100 и менее

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Успешное изучение курса требует от обучающихся посещения лекций, активной работы на лабораторных занятиях, выполнения всех учебных заданий преподавателя, ознакомления с основной и дополнительной литературой.

Запись **лекции** – одна из форм активной самостоятельной работы обучающихся, требующая навыков и умения кратко, схематично, последовательно и логично фиксировать основные положения, выводы, обобщения, формулировки. В конце лекции преподаватель оставляет время (5 минут) для того, чтобы обучающиеся имели возможность задать уточняющие вопросы по изучаемому материалу. Из-за недостаточного количества аудиторных часов некоторые темы не удается осветить в полном объеме, поэтому преподаватель, по своему усмотрению, некоторые вопросы выносит на самостоятельную работу студентов, рекомендуя ту или иную литературу. Кроме этого, для лучшего освоения материала и систематизации знаний по дисциплине, необходимо постоянно разбирать материалы лекций по конспектам и учебным пособиям. В случае необходимости обращаться к преподавателю за консультацией.

Подготовка к **лабораторным занятиям**.

При подготовке к лабораторным занятиям студент должен изучить теоретический материал по теме занятия (использовать конспект лекций, изучить основную литературу, ознакомиться с дополнительной литературой, при необходимости дополнить конспект, делая в нем соответствующие записи из литературных источников). В случае затруднений, возникающих при освоении теоретического материала, студенту следует обращаться за консультацией к преподавателю. Идя на консультацию, необходимо хорошо продумать вопросы, которые требуют разъяснения.

В начале лабораторного занятия преподаватель знакомит студентов с темой, оглашает план проведения занятия, выдает задание. В ходе выполнения лабораторной работы студент может обратиться к преподавателю за консультацией или разъяснениями. При выполнении работ студент оформляет альбом (тетрадь) по лабораторному практикуму, который сдается на проверку в конце семестра.

Результаты выполнения лабораторных работ оцениваются в баллах, в соответствии с балльно-рейтинговой системой университета.

Подготовка к **устному опросу**.

При подготовке к устному опросу необходимо изучить теоретический материал по дисциплине. С целью оказания помощи студентам при подготовке к занятиям преподавателем проводится групповая консультация с целью разъяснения наиболее сложных вопросов теоретического материала.

Подготовка к **докладу с презентацией**.

Доклады делаются с целью проверки теоретических знаний обучающегося, его способности самостоятельно приобретать новые знания, работать с информационными ресурсами и извлекать нужную информацию.

Продолжительность доклада не должна превышать 5 минут. Тему доклада студент выбирает по желанию из предложенного списка.

При подготовке доклада студент должен изучить теоретический материал, используя основную и дополнительную литературу, обязательно составить план доклада (перечень рассматриваемых им вопросов, отражающих структуру и последовательность материала), подготовить презентацию.

Выступление должно строиться свободно, убедительно и аргументировано. Преподаватель следит, чтобы выступление не сводилось к простому воспроизведению текста, не допускается простое чтение составленного конспекта доклада. Выступающий также должен быть готовым к вопросам аудитории и дискуссии.

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

Основная литература

1. Елфимов, В. И. Основы общей химии : учебное пособие / В. И. Елфимов. — 2-е изд. — Москва : ИНФРА-М, 2019. — 256 с. — (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-010066-1. - Текст : электронный. - URL: https://znanium.com/catalog/product/915097

2. Суворов, А. В. Общая химия : учебник / А. В. Суворов, А. Б. Никольский. – 6-е изд. – Санкт-Петербург : Химиздат, 2020. – 624 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=599264

3. Игнатов, С. К. Квантовая химия. Химическая связь и теория молекул : учебное пособие / С. К. Игнатов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2016. — 136 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/153007

Дополнительная литература

1. Крашенинин, В. И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие : [16+] / В. И. Крашенинин, Е. Г. Газенаур, Л. В. Кузьмина. – Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678

2. Бурмистрова, Н. А. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / Н. А. Бурмистрова. — Саратов : СГУ, 2020. — 68 с. — ISBN 978-5-292-04636-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/170586

3. Игнатов, С. К. Задачи по квантовой химии : учебно-методическое пособие / С. К. Игнатов. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2015. — 28 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/153008

4. Крашенинин, В. И. Квантовая химия : учебное пособие : [16+] / В. И. Крашенинин, Л. В. Кузьмина, Е. Г. Газенаур ; Кемеровский государственный университет. – Кемерово :

Кемеровский государственный университет, 2019. – 82 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=600391

Интернет-ресурсы

1.https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%97%D0%B0%D0%B3%D0%BB%D0%B0%D0%B2%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%81%D1%82%D1%80%D0%B0%D0%BD%D0%B8%D1%86%D0%B0

2. http://school-sector.relarn.ru/nsm/chemistry/Rus/Data/bio/bio.html

3. https://ege.sdamgia.ru/