

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор по образовательной  
деятельности

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев  
«\_\_» \_\_\_\_\_

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1159475	Химическая связь и строение молекул

Екатеринбург

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Нанотехнологии и микросистемная техника	<b>Код ОП</b> 1. 28.03.01/33.01
<b>Направление подготовки</b> 1. Нанотехнологии и микросистемная техника	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 28.03.01

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Сафронов Александр Петрович	доктор физико-математических наук, профессор	профессор	департамент фундаментальной и прикладной химии

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Химическая связь и строение молекул

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль направлен на формирование и закрепление знаний в области физической химии, необходимых для создания и характеристики наноматериалов. Даются теоретические основы строения вещества, принципы описания химической связи, особенности решения основных задач химии по идентификации химического строения и структуры вещества.

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Химическая связь и строение молекул	3
ИТОГО по модулю:		3

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

<b>Пререквизиты модуля</b>	1. Основы современной химии 2. Теоретические основы профессиональной деятельности
<b>Постреквизиты и кореквизиты модуля</b>	Не предусмотрены

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Химическая связь и строение молекул	ОПК-1 - Способен формулировать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, применяя фундаментальные знания основных закономерностей	З-1 - Привести примеры основных закономерностей развития природы, человека и общества  З-2 - Обосновать значимость использования фундаментальных естественнонаучных и философских знаний в формулировании и решении задач профессиональной деятельности знаний

	<p>развития природы, человека и общества</p>	<p>У-1 - Использовать понятийный аппарат и терминологию основных закономерностей развития природы, человека и общества при формулировании и решении задач профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Определять конкретные пути решения задач профессиональной деятельности на основе фундаментальных естественнонаучных знаний</p> <p>П-1 - Работая в команде, формулировать и решать задачи в рамках поставленного задания, относящиеся к области профессиональной деятельности</p>
	<p>ПК-1 - Способен проводить экспериментальные исследования по получению и измерению характеристик материалов и компонентов нано- и микросистемной техники</p>	<p>З-2 - Сделать обзор научно-технической информации по поставленной профессиональной задаче для оптимального планирования экспериментального исследования</p> <p>У-2 - Систематизировать полученные экспериментальные результаты</p>
	<p>ПК-2 - Способен проводить анализ результатов измерений параметров наноматериалов и наноструктур и готовить научно-технические отчеты</p>	<p>З-1 - Определить методы обработки и анализа результатов измерений</p> <p>У-2 - Правильно интерпретировать результаты проведенных измерений</p> <p>У-3 - Соотносить результаты измерений с современным мировым состоянием дел в области нанотехнологий на основе актуальных литературных данных</p> <p>П-1 - Сделать вывод о параметрах наноматериалов и наноструктур на основе анализа результатов измерений</p>

### 1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Химическая связь и строение молекул**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Сафронов Александр Петрович	доктор физико- математических наук, профессор	профессор	департамент фундаментальной и прикладной химии

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 3 от 17.03.2022 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Сафронов Александр Петрович, профессор, департамент фундаментальной и прикладной химии

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Введение	<p>Предпосылки возникновения квантовой механики. Нерешенные проблемы классической физики, послужившие толчком к созданию новой физической теории. Проблема излучения абсолютно черного тела. Работы Планка. Квантование энергии. Явление фотоэффекта. Проблема стабильности и размеров атома. Постулаты Бора. Корпускулярно-волновой дуализм. Принцип неопределенности Гейзенберга.</p> <p>Предмет квантовой механики и квантовой химии. Главные тенденции в развитии квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки.</p>
2	Математический аппарат квантовой теории	<p>Постулаты квантовой механики.</p> <p>Функция состояния системы, волновая функция, ее физический смысл и свойства. Плотность вероятности нахождения частиц в различных точках пространства. Ортогональные и нормированные функции, нормировочные множители. Пространство функций, базис пространства функций, представление волновых функций в базисе пространства.</p> <p>Операторы динамических переменных: способ построения, физический смысл и свойства. Линейность и самосопряженность операторов. Коммутирующие операторы. Представление операторов в матричной форме и действия с ними. Операторы основных физических величин: координаты,</p>

		<p>импульса, энергии системы и ее компонент, момента количества движения (импульса) и его компонент, оператор Гамильтона (гамильтониан). Коммутационные соотношения между операторами основных физических величин.</p> <p>Операторные уравнения. Взаимосвязь операторов и волновых функций. Собственные функции и собственные значения операторов. Вырождение. Собственные функции самосопряженных операторов, коммутирующих операторов, представление оператора в базисе собственных функций.</p> <p>Уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Волновые функции как собственные функции гамильтониана системы. Решение уравнения Шредингера для различных систем – основная задача квантовой химии.</p> <p>Расчет физических величин методами квантовой механики. Проблема точного и среднего значения физической величины, ее взаимосвязь с принципом неопределенности.</p> <p>Точные решения уравнения Шредингера. Поступательное движение частицы в пространстве и в замкнутом объеме. Квантование энергии и волновой функции. Квантовые числа. Колебательное движение частиц. Гармонический осциллятор, квантование его энергии. Спектр гармонического осциллятора. Основы колебательной спектроскопии. Вращательное движение частиц. Энергия вращательного движения. Вращательные спектры двухатомных молекул, их особенности и использование для расчета межатомных расстояний. Волновые функции жесткого ротатора, сферические гармоники.</p>
3	Механизм химической связи	<p>Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Радиальная и угловая части волновой функции. Квантование энергии, орбитального момента и его проекций для движения электрона в атоме водорода. Атомная орбиталь. Распределение электронной плотности на разных типах орбиталей. Спин электрона. Строение атома водорода и Периодическая система элементов Д. И. Менделеева. Многоэлектронные атомы. Необходимость приближенных методов для решения уравнения Шредингера. Метод Хартри. Одноэлектронная волновая функция. Учет межэлектронного отталкивания, самосогласование. Полная волновая функция системы, принцип Паули, детерминант Слейтера, метод Хартри–Фока, кулоновский и обменный интегралы. Атомная орбиталь Слейтера–Зенера, Экранирование заряда ядра.</p> <p>Методы приближенного решения уравнения Шредингера. Метод возмущений. Нахождение поправок к энергии и волновой функции. Снятие вырождения атомных орбиталей. Вариационный метод. Метод Ритца. Вековое (секулярное) уравнение. Нахождение энергий различных состояний системы и волновых функций, отвечающих этим состояниям. Основные подходы к квантовому рассмотрению химической связи в молекулах. Методы валентных схем (ВС) и молекулярных орбиталей (МО), их сравнительная характеристика.</p>

		<p>Метод Гайтлера–Лондона. Волновая функция и энергия химической связи для молекулы водорода. Теория гибридизации Полинга. Волновые функции гибридных атомных орбиталей. Основные положения метода ВС. Валентные схемы многоатомных молекул.</p> <p>Метод Рутана. Молекулярная орбиталь. Использование атомных орбиталей в качестве базиса для молекулярных орбиталей. Одноэлектронное уравнение Шредингера для молекулы и его решение вариационным методом. Учет межэлектронного отталкивания в молекулах.</p> <p>Самосогласование. Решение системы уравнений Рутана для молекулярного иона водорода. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Полная волновая функция молекулы. Электронные конфигурации.</p>
4	Примеры полуэмпирических расчетов	<p>Полуэмпирические подходы в квантовой химии, их необходимость и основные принципы. Классификация полуэмпирических методов.</p> <p>Качественное рассмотрение молекулярных орбиталей двухатомных молекул. Принципы комбинирования атомных орбиталей. Учет свойств симметрии. Типы молекулярных орбиталей, порядок их заполнения электронами.</p> <p>Комплексные соединения. Теория кристаллического поля. Снятие вырождения (расщепление) атомных орбиталей центрального иона в комплексах разного строения. Лиганды сильного и слабого поля. Спектрохимический ряд. Устойчивость комплексов. Спектральные и магнитные свойства комплексов. Теория поля лигандов. Групповые орбитали лигандов. Молекулярные орбитали комплексов сильного и слабого поля.</p> <p>Органические соединения с кратными связями. Теория МО Хюккеля. Параметризация. Энергия и волновые функции молекулярных орбиталей линейных молекул с кратными связями. Сопряжение, энергия резонанса, расчет из спектральных и термодимических данных. Энергия и волновые функции молекулярных орбиталей циклических сопряженных молекул, учет симметрии. Ароматичность и антиароматичность. Особенности рассмотрения гетероциклов в методе Хюккеля. Расчет распределения электронной плотности в молекулах с кратными связями. Оценка реакционной способности непредельных соединений.</p>

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-	Технология формирования уверенности и	ПК-1 - Способен проводить экспериментальные	У-2 - Систематизировать полученные

	исследовательская	готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности	исследования по получению и измерению характеристик материалов и компонентов нано- и микросистемной техники	экспериментальные результаты
--	-------------------	---	---	------------------------------

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Химическая связь и строение молекул

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Крашенинин, В. И.; Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678> (Электронное издание)
2. Крашенинин, В. И.; Квантовая химия : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2019; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=600391> (Электронное издание)
3. Грей, Г., Г., Дяткина, М. Е.; Электронная и химическая связь : учебное пособие.; Мир, Москва; 1967; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=222465> (Электронное издание)
4. Громова, Е. Ю.; Строение атома. Химическая связь : учебное пособие.; Казанский научно-исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань; 2017; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=500901> (Электронное издание)
5. Герцберг, Г., Г., Кондратьев, В. Н.; Спектры и строение двухатомных молекул; Изд-во иностр. лит., Москва; 1949; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=255713> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Краснов, К. С.; Молекулы и химическая связь : [учебное пособие для химико-технологических специальностей вузов].; Высшая школа, Москва; 1984 (49 экз.)
2. Степанов, Н. Ф.; Квантовая механика и квантовая химия : [Учеб. для вузов].; Мир, Москва; 2001 (71 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Электронная библиотека УрФУ [<https://opac.urfu.ru>]

Электронный научный архив УрФУ [<https://elar.urfu.ru>]

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ [<https://study.urfu.ru>]

Зональная научная библиотека УрФУ [<https://lib.urfu.ru>]

#### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### **Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы**

Российская государственная библиотека. [<http://www.rsl.ru>]

Государственная публичная научно-техническая библиотека России. [<http://www.gpntb.ru>]

## **3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Химическая связь и строение молекул**

#### **Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением**

Таблица 3.1

<b>№ п/п</b>	<b>Виды занятий</b>	<b>Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>	<b>Перечень лицензионного программного обеспечения</b>
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная  Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная  Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная  Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM

4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
5	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM