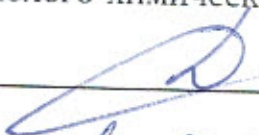


ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО ПО НАУКЕ И ОБРАЗОВАНИЮ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ТГПУ)

«Утверждаю»
Декан биолого-химического факультета


Дырин В. А.

« 2 » сентября 2011г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерное моделирование
(Б.3.В.02)

ТРУДОЕМКОСТЬ (В ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦАХ) 5

Направление подготовки: 020100.62 Химия

Профиль подготовки: физическая химия

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр

1. Цели и задачи дисциплины:

Основная цель изучения курса квантовая химия - получение знаний бакалаврами в области теории строения атомов и молекул для их использования при проведении квантово-химических расчетов химических объектов.

Глубокие знания основ квантовой химии необходимы бакалаврам для преподавания курса химии в школах, лицеях и вузах на достаточно высоком научном уровне. Известно, что современная химическая наука уделяет большое внимание исследованию строения молекул и описанию природы связи в них. При этом наряду с интенсивно развивающимися экспериментальными методами, использующими новейшие достижения физики, все более активно привлекаются теоретические подходы. Компьютерное моделирование в химии, или другими словами начала квантовой химии являются источником многих модельных представлений, используемых современной химической теорией. Именно в рамках этой науки нашел объяснение феномен образования химической связи. Задачей данного курса является объяснение происхождения и смысла этих и многих других понятий на уровне, который доступен бакалаврам биолого-химического факультета.

2. Место учебной дисциплины в структуре основной образовательной программы.

Дисциплина «Компьютерное моделирование» относится к вариативной (профильной) части профессионального цикла Основной образовательной программы (Б.3).

Для освоения дисциплины студенты используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения химии в общеобразовательной школе.

«Компьютерное моделирование» является основой для изучения электронного строения, пространственных структур молекул в области неорганической и органической химии, различных видов спектроскопии, механизмов органических реакций.

3. Требования к уровню освоения дисциплины.

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие профессиональных компетенций (ПК-2, ПК-3, ПК-6, ПК-7, ПК-8, ПК-11), общекультурных компетенций (ОК-6, ОК-7, ОК-9, ОК-10). Освоивший дисциплину «Компьютерное моделирование» должен

- владеть:

основными принципами построения химических соединений (ОК-6, ОК-7, ПК-2, ПК-3);

- быть способным:

составить электронную формулу любой молекулы (ОК-9, ПК-6, ПК-7);

проводить конкретные полуэмпирические и неэмпирические расчеты молекул и химических реакций для установления структуры и реакционной способности соединений (ОК-10, ПК-8, ПК-11);

- понимать возможности использования современных компьютерных квантово-химических программ ChemOffice, HyperChem, Gaussian (ОК-6, ПК-11);

- уметь применять полученные знания:

для объяснения природы взаимодействия молекул в процессе химических реакций (ПК-2, ПК-3) ;

в педагогической деятельности (ПК-2, ПК-3, ПК-11);

- **быть готовым** к самостоятельному проведению исследований, постановке компьютерного эксперимента, использованию информационных технологий для решения научных и профессиональных задач, анализу и оценке результатов теоретических исследований (ПК-4, ПК-8, ПК-11).

В результате изучения дисциплины студент должен

знать:

- область применения квантово-химических методов расчета электронной структуры молекул химических веществ, используемых в органической и неорганической химии;

- сущность, точность современных расчетных методов квантовой химии и их приложений к проблемам структуры молекул и механизмов химических реакций;

владеть:

- навыками интерпретации полученных расчетных данных и проводить анализ на их основе;

- навыками проведения конкретных полуэмпирических и неэмпирических расчетов молекул и химических реакций для установления структуры и реакционной способности молекул на основе использования современных компьютерных квантово-химических программ ChemOffice, HyperChem, Gaussian, Spartan, ADF;

уметь:

- применять полученные знания и навыки при выполнении курсовых и дипломных работ и в будущей профессиональной деятельности.

4. Общая трудоемкость дисциплины 5 зачетных единиц и виды учебной работы.

Вид учебной работы	Трудоемкость: зачетные единицы, часы (в соответствии с учебным планом) Всего: 5 зачетных единицы – 180 часов	Распределение по семестрам, часы (в соответствии с учебным планом)			
		7	8		
Лекции	30	30			
Практические занятия (ПЗ)					
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	60	60			
Интерактивная работа	28	28			
Самостоятельная работа	63	63			
Курсовой проект (работа)					
Расчетно-графические работы					
Реферат					
Формы текущего контроля			Кол-		

			ло- квиу- мы, контр оль- ные рабо- ты, тести- рова- ние		
Вид итогового контроля (зачет, экзамен)	27	27	экза- мен		

5. Содержание дисциплины.

5.1. Разделы дисциплины и виды занятий (Тематический план):

№ п/п	Раздел дисциплины	Лекции	Практические занятия, семинары	Лабораторные занятия	В т.ч. интерактивные формы обучения (не менее 20 %)	Самостоятельная работа
1	2	3	4	5		
1	Основные положения квантовой механики.	4			0.8	3
2	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.	2			0.4	3
3	Теория химической связи.	2			0.4	3
4	Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул.	2			0.4	3
5	Расчетные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета.	4			0.8	3
6	Неэмпирические методы расчета. Неэмпирическая теория молекулярных орбиталей.	6			1.2	3
7	Электрические свойства молекул. Дипольный момент. Межмолекулярное притяжение.	1			0.2	3
8	Донорно-акцепторные комплексы.	4			0.8	3
9	Кислоты и основания. Принцип ЖМКО.	4			0.8	3
10	Теория возмущений молекулярных орбиталей.	1			0.2	3
1	Знакомство с программами ChemOffice. Построение молекул, оптимизация структуры, методы молекулярной механики, полуэмпирические методы расчета.			12	2,4	3
2	Расчет электронной структуры молекул по программе GAMESS и анализ результатов.			8	1,2	3
3	Знакомство с программой HyperChem6. Визуализация, построение моделей молекул.			6	1,4	3
4	Расчет термодинамических величин и молекулярных орбиталей полуэмпирическими методами по программе HyperChem6..			4	1,4	3
5	Расчет ИК- и УФ-спектров с использованием HyperChem6.			4	1,2	3
6	Знакомство с программами Gaussian03, Spartan, ADF для расчета неэмпирическими методами.			6	2,4	3
7	Расчет ЯМР характеристик алканов, алкенов, алкинов, ароматических соединений.			4	2,4	3
8	Расчет переходных состояний химических реакций.			4	2,4	3
9	Анализ рассчитанных спектров ИК- и Рамановских.			4	2,4	3
10	Расчет возбужденных состояний и УФ-спектров.			4	2,4	3

11	Анализ результатов расчета натуральных валентных орбиталей и использование растворителя.			4	2,4	3
	ИТОГО	30		60	28 (20%)	63

5. 2. Содержание разделов дисциплины

- 5.2.1. Постулаты квантовой механики. Соотношения неопределенностей. Вариационный метод. Теория возмущений.
- 5.2.2. Уравнение Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали. Расчет различных свойств водородоподобного атома. Спектры и правила отбора. Угловые моменты атома. Физический смысл квантовых чисел. Магнитный орбитальный момент атома. Спин электрона. Метод самосогласованного поля Хартри. Метод Хартри-Фока. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Орбитали Слетера-Зенера. Двухэкспоненциальные и гауссовские орбитали. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Квантовые числа многоэлектронного атома. Термы многоэлектронного атома. Электронные спектры.
- 5.2.3. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей в молекулах. Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод теории возмущений. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала и природа химической связи. Электростатическая теорема.
- 5.2.4. Пути и энергетика химической реакции. ППЭ и динамика химических реакций. ППЭ электронно-возбужденных состояний. Колебания молекул. Гармонические колебания молекул. Расчет термодинамических функций. Эффект Яна-Теллера. Фундаментальные аспекты. Формы потенциальной энергии. Колебания связей. Валентные углы. Торсионные углы. Взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Электростатические взаимодействия. Энергия силового поля и термодинамика. Оптимизация геометрических параметров.
- 5.2.5. Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Инвариантность полуэмпирических методов. Параметризации методов полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием (ППДП/2, ППДП/С). Параметризация методов частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием (ЧПДП, МЧПДП/3). Методы пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием (АМ1, РМ3, МПДП). Метод Парриера-Парра-Попла (ППП). Расширенный метод Хюккеля.
- 5.2.6. Базисные ряды атомных орбиталей. Слетеровские функции. Контракционные функции Гаусса. Поляризационные и диффузные функции. Расщепленные валентные орбитали. Эффективные потенциалы остова. Критерии сходимости. Системы с открытыми оболочками. Краткий обзор неэмпирической теории: энергия, геометрия, зарядовое распределение. Включение электронной корреляции в теорию МО. Многоконфигурационная теория поля.

Конфигурационное взаимодействие. Теория возмущения. Кластерная теория. Методы параметризации.

5.2.7. Внутри- и межмолекулярные взаимодействия. Электрические свойства молекул и межмолекулярные силы. Постоянный дипольный момент, поляризуемость. Виды межмолекулярных сил притяжения. Пространственное отталкивание и Ван-дер-Ваальсовы радиусы. Теория смещения электронных пар. Индуктивный и мезомерный эффекты с точки зрения квантовой химии.

5.2.8. Равновесие молекула-димер. Водородная связь. Теория строения комплексных соединений. Теория локализованных молекулярных орбиталей. Кристаллическая теория поля. Теория поля лигандов. Октаэдрические и тетраэдрические комплексные соединения. Дативное и донорно-акцепторное взаимодействие.

5.2.9. Кислоты и основания Льюиса и Бренстеда. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Принцип жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО). Применение принципа ЖМКО. Теоретическое обоснование принципа ЖМКО. Жесткость и мягкость кислот и оснований, применение в органической химии. Взаимодействие граничных орбиталей. Электростатическое взаимодействие. Сольватация в растворе.

5.2.10. Теория возмущения молекулярных орбиталей. Возмущение первого и второго порядка. Энергетические составляющие взаимодействия молекул. Граничные орбитали.

5.2.11. Учет сольватации в квантово-химических расчетах. Классификация моделей. Сольватонная модель. Модель самосогласованного поля реакции. Приближение супермолекулы. Квантово-химические расчеты в молекулярной спектроскопии. Силовые постоянные химических связей. Интенсивность полос поглощения в ИК-спектрах.

5.3. Лабораторный практикум.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ
1	1	Знакомство с программами ChemOffice, HyperChemPro6. Построение молекул, оптимизация структуры, методы молекулярной механики, полуэмпирические методы расчета.
2	2	Расчет термодинамических величин и молекулярных орбиталей полуэмпирическими методами.
3	3	Расчет ИК и УФ-спектров с использованием HyperChem Pro 6.
4	4	Знакомство с программами Gaussian98, Spartan, ADF для расчета неэмпирическими методами.
5	5	Расчет ЯМР характеристик алканов, алкенов, алкинов, ароматических соединений.
6	6	Расчет переходных состояний химических реакций.
7	7	Анализ рассчитанных спектров ИК- и Рамановских.
8	8	Расчет термодинамических параметров изодермических реакций.

9	9	Расчет возбужденных состояний и УФ-спектров.
10	10	Анализ результатов расчета натуральных валентных орбиталей и использование растворителя.

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

6.1. Основная литература:

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. –М.: Соломон-Пресс -2005.
2. Полещук, О. Х., Кижнер Д. М. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие в 2 частях/ О. Х. Полещук. - Томск: ТГПУ, 2007, 2009. - 176, 155 с.
3. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: учебное пособие/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 159 с.
4. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: методические указания/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 171 с.

6.2. Дополнительная литература:

1. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов/Дон.: Феникс. -1997. -560с.
2. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. -2001. -519с.
3. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. -2001. -532с.
4. Симкин Б. Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М. Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов/Дон.: Феникс. -1997. -272с.
5. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. –М.: Мир. -1976.
6. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: -Мир. –1990.

6.3. Средства обеспечения освоения дисциплины:

<http://www.mnr.gov.ru/>
<http://webbook.nist.gov/chemistry>
<http://en.wikipedia.org>
<http://bse.pnl.gov>
<http://www.xumuk.ru>
<http://www.chem.msu.su>
<http://www.dace.ru>
<http://www.hypercube.com>
<http://www.cambridgesoft.com>
<http://qcc.ru>
<http://scientific.narod.ru>

6. 4. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Расчетные лицензионные квантово-химические программы: ChemOffice'10, HyperChem852, Gaussian'03, МОРАС.

Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами.

7. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

7.1. Методические рекомендации (материалы) преподавателю:

Реализация компетентностного подхода должна предусматривать широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (семинаров в диалоговом режиме, дискуссий, рецензирования студентами работ друг друга, оппонирования студентами рефератов, экспертных оценок группами студентов совместно с преподавателями и работодателями, компьютерных симуляций, деловых и ролевых игр, разбора конкретных ситуаций, психологических и иных тренингов, групповых дискуссий, работы студенческих исследовательских групп, вузовских телеконференций) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся.

В рамках учебных курсов должны быть предусмотрены встречи с представителями российских и зарубежных компаний, государственных и общественных организаций, мастер-классы экспертов и специалистов.

7.2. Методические рекомендации для студентов:

Для освоения дисциплины следует ознакомиться с содержанием разделов (5.2.) и перечнем вопросов, которые студенты должны будут подготовить самостоятельно (8.2), написать реферат по одной из предлагаемых тем (8.1), выбрать тему (8.3) совместно с другими студентами, обучающимися по специальности «Компьютерное моделирование», и принять участие в дискуссии. Перечень вопросов для промежуточной аттестации представлен в разделе 8.5.

8. Формы текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся.

8.1. Тематика курсовых работ:

Электростатическая природа водородной связи

Кислоты и основания в координационной химии.

Объяснение биологических функций гемоглобина на основании квантово-химических расчетов.

Изучение влияния оптической изомерии на фармакологические свойства лекарств

Индуктивный и резонансный эффекты в органической химии

Теория жестких и мягких кислот и оснований.

Транс-влияние в химии координационных соединений.

Донорные числа.

Рентгеноэлектронная и фотоэлектронная спектроскопия.

Метод ядерного магнитного резонанса в медицине.

8.2. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы:

1. Энергетический спектр простейших систем: частицы в прямоугольном потенциальном ящике, гармонического осциллятора и жесткого ротатора.
2. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии. s - и p -орбитали. r -электронное приближение.
3. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридные орбитали и гибридизация.
4. Теория кристаллического поля. Расщепление d - и f -уровней в полях различной симметрии.
5. Химическая связь в комплексных соединениях на основании локализованных орбиталей.

6. Атом водорода с точки зрения теории Бора.
7. Основные характеристики химической связи.
8. Методы исследования структурных свойств молекул и кристаллических соединений.
9. Поясните, что собой представляют конформации молекул и приведите примеры молекул с конформационной изомерией.
10. Каковы основные составляющие и основные типы межмолекулярных взаимодействий?
11. Каковы основные типы кристаллических решеток?
12. Каковы основные типы дефектов в реальных кристаллах?
13. Сформулируйте правила Гиллеспи-Найхольма. Для частиц BF_3 , NH_3 , IF_3 , NH_4^+ , SeO_2 , ClO_2^- изобразите структурные формулы, определите число связывающих и неподеленных электронных пар, стерическое число и геометрию частиц.

8.3. Вопросы к зачету:

1. Структуры внешнего и предвнешнего электронных слоев атомов элементов следующие: $3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$; $4s^2 4p^6 4d^5 5s^1$; $5s^2 5p^6 5d^4 6s^2$. Назовите эти элементы.
2. Составьте уравнение ядерной реакции: ${}_{16}^{32}\text{S} + {}_1^2\text{D} \rightarrow {}_0^1\text{n} + \dots$
3. Укажите как меняется величина эффективного заряда на атомах галогенов в ряду соединений HF , HCl , HBr , HI ($\mu_{\text{экс.}}$ для HF равен $6,3 \cdot 10^{-30}$ Кл·м).
4. Фотон γ -излучения с энергией $1,024 \cdot 10^6$ эВ может образовать пару частиц: электрон и позитрон. Какова масса позитрона?
5. Вычислить энергию и массу, соответствующие фотону, характеризующемуся длиной волны 589 нм.
6. Покажите, какие орбитали и как участвуют в образовании связей в соединении $\text{K}(\text{NH}_3)_4$.
7. Какую геометрическую форму имеет ион IO_3^- ?
8. В парах PF_5 имеет форму бипирамиды, а PCl_5 в кристаллическом состоянии состоит из ионов PCl_4^+ и PCl_6^- . Какие гибридные орбитали атомов фосфора образуют связи в обоих случаях?
9. Составьте схему образования частиц BF_4^- и NH_4^+ . Укажите валентность и степень окисления атомов бора и азота.
10. Как вы считаете, справедливо ли утверждение: если в молекуле AB_n связи полярные, то и сама молекула будет полярной? Ответ подтвердите на примере следующих молекул: BeF_2 , BF_3 , CH_4 , NH_3 , SF_6 , H_2O , CO_2 и SO_2 .
11. По методу МО сравните кратность и энергию связей в ряду частиц: O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} .
12. Сравните кратность, энергию связей и магнитные свойства частиц: CO^+ , CO^- и CO .
13. Определите геометрическое строение комплексных ионов. Какого типа гибридные орбитали комплексообразователя участвуют в образовании связей с лигандами: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ - диамагнитный; $[\text{PdCl}_4]^{2-}$ - диамагнитный; $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$; $[\text{AuCl}_4]^-$ - диамагнитный; $[\text{NiF}_4]^-$ - парамагнитный.
14. На основе теории кристаллического поля установите, будут ли диамагнитными или парамагнитными комплексы, в которых лиганды создают сильное поле: $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$; слабое поле: $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$.

8.4. Примеры тестовых заданий

1. Каковы размерности: а) волновой функции одной частицы; б) вероятности обнаружения частицы в элементарном объеме dt ?
2. Как должно выглядеть соотношение неопределенностей координаты и импульса в классической механике?
3. Можно ли заморозить молекулу при 0 K?
4. Исходя из принципа неопределенности оцените энергию связи в атоме водорода.
5. Найдите наиболее вероятное расстояние от электрона до ядра в ионе He^+
6. При помощи правил Слэтера определите константы экранирования S для АО $3d$ атома железа.
7. При помощи правил Слэтера определите эффективный заряд ядра для $6s$ -электрона атома гадолиния.
8. В какой системе большая энергия диссоциации: молекуле N_2 и ионах N_2^+ и N_2^- .
9. С точки зрения МО, сколько находится электронов на несвязывающей орбитали в анионе FHF^- .
10. Какой порядок понижения относительных энергий sp -, sp^2 -, sp^3 -гибридных орбиталей?
11. Какова симметрия распределения электронной плотности в sp^2 -гибридном атоме углерода?
12. Какой вклад p -орбитали в связывающие гибридные орбитали атома азота в молекуле аммиака (валентный угол равен 107°)?
13. Для какого типа гибридизации sp^3 -, sp^2 -, sp - электроотрицательность атома имеет наибольшее значение?
14. Какая из гибридных орбиталей sp -, sp^2 -, sp^3 обладает наибольшим дипольным моментом?
15. Укажите симметрию следующих молекул: SnBr_2 , GaI_3 , PF_3 , BrF_4^- , SbCl_5 , SF_6 .
16. Какие из указанных молекул неполярные: FNO , BrF_3 , H_2S , XeO_4 ?
17. В какой молекуле PH_3 или H_2S валентный угол больше?
18. Уменьшается ли валентный угол в угловых молекулах AH_2 с уменьшением электроотрицательности центрального атома A .
19. Полагая, что в молекулах AHal_2 каждый атом галогена вносит в базисный набор по одной АО p -типа, направленной прямо к центральному атому A , какие молекулы будут нелинейными: BeF_2 , BF_2 , CF_2 , ClF_2 , ClF_2^- ?
20. Как зависят валентные углы молекулы AH_3 от уменьшения электроотрицательности центрального атома?
21. Полагая, что каждый атом галогена участвует в связывании только одним валентным электроном, какие молекулы имеют плоское строение BF_3 , CF_3^+ , NF_3 , ClF_3 ?
22. Сколько неспаренных электронов у ионов Cr^{3+} , Mn^{2+} , Co^{3+} в сильном октаэдрическом поле лигандов?
23. Сколько неспаренных электронов у ионов Cr^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+} в очень слабом октаэдрическом поле?
24. Низкоспиновые тетраэдрические комплексы никогда не были получены, хотя существует много высокоспиновых комплексов с этой геометрией. Какой вывод относительно величины энергии расщепления относительно энергии спаривания можно сделать из этого факта?

25. Обнаружено, что некоторые комплексы платины являются активными противораковыми препаратами. К их числу относятся $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_4$ и $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$. Являются ли эти комплексы внутриорбитальными или внешнеорбитальными?
26. Если шесть ионов Br^- заместят в $\text{Cr}(\text{NH}_3)_6^{3+}$ шесть молекул аммиака, возрастет или уменьшится при этом энергия расщепления кристаллическим полем?
27. В рамках теории кристаллического поля определите вклад d-гибридизации (в %) атома железа в комплексе $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$.
28. Сколько неспаренных d-электронов остается в каждом из следующих комплексов:
- $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$ (плоско-квадратная структура),
 - CoF_6^{3-} (высокоспиновый комплекс),
 - $\text{Co}(\text{NH}_3)_6^{3+}$ (низкоспиновый комплекс)?
29. Какая окраска комплекса $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_2]^+$?
30. С каким параметром теории кристаллического поля связано то, что комплексы $\text{Cu}(\text{II})$ с аминами имеют значительно более интенсивную голубую окраску, чем гексааквоион $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$?
31. Структура внешнего и предвнешнего электронных слоев атомов элемента $3s^23p^63d^54s^1$; $4s^24p^64d^55s^1$. Назовите этот элемент.
32. Укажите, как меняется величина эффективного заряда на атомах галогенов в ряду соединений HF , HCl , HBr , HI .
33. Неопределенность измерения положения электрона в атоме равна $5,3 \cdot 10^{-11}$ м. Скорость электрона равна $2,2 \cdot 10^6$ м/с. Равна ли неопределенность определения скорости электрона самой скорости?
34. Вычислить энергию, соответствующую фотону, характеризующемуся длиной волны 589 нм.
35. Сколько π -связей имеет атом йода в ионе IO_3^- ?
36. В парах PF_5 имеет форму бипирамиды. Какую s-гибридизацию (в %) имеет центральный атом?
37. Какую связь образует ион фтора в BF_4^- ?
38. Как вы считаете, справедливо ли утверждение: если в молекуле AB_n связи полярные, то и сама молекула будет полярной?
39. По методу МО сравните энергию связей в ряду частиц: O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} .
40. Сравните количество неспаренных электронов в частицах: CO^- , CO^+ и CO .
41. Какое количество энергии несет один квант света с длиной волны $7,5 \cdot 10^{-7}$ м?
42. Вычислите энергию (эВ), которой обладает электрон, находясь на третьем энергетическом уровне в атоме водорода.
43. Определите скорость вращения электрона в атоме водорода, если радиус орбиты равен $2,116 \cdot 10^{-10}$ м.
44. Вычислите скорость движения электрона с длиной волны $0,242 \cdot 10^{-7}$ м.
45. Рассчитайте длину волны электрона, имеющего скорость $2,2 \cdot 10^3$ м/с.
46. Рассчитайте длину волны де Бройля для молекул фтора, движущихся со скоростью 500 м/с.
47. Какую энергию (эВ) нужно сообщить невозбужденному атому водорода, чтобы он мог испускать излучение с длиной волны $1,5 \cdot 10^{-7}$ м?
48. Сколько свободных d-орбиталей содержится в атоме Sc ?

49. Сколько свободных f-орбиталей содержится в атоме с порядковым номером 59?
50. Энергетическое состояние внешнего электрона атома описывается следующими значениями квантовых чисел: $n=3$, $l=0$, $m_l=0$. Атомы каких элементов имеют такой электрон?
51. Сколько электронов находится на предвнешних уровнях в атоме Ti?
52. Сколько неспаренных электронов в атоме йода?
53. Зная, что длина волны рентгеновского излучения K_α марганца равна $2,13 \cdot 10^{-10}$ м, вычислите порядковый номер и укажите элемент, для которого длина волны K_α равна $3,35 \cdot 10^{-10}$ м.
54. Относительная электроотрицательность йода равна 2,5, а его потенциал ионизации 10,45 эВ. Определите сродство йода к электрону (кДж/моль).
55. Вычислите относительную электроотрицательность углерода, если первый потенциал ионизации равен 11,26 эВ, а его сродство к электрону 1,12 эВ.
56. Исходя из величин потенциалов ионизации, укажите какой из элементов Li, Na, K, Rb, Cs является более сильным восстановителем.
57. Исходя из величин электроотрицательности, укажите, как в приведенном ряду F, Cl, Br, I изменяется способность атомов принимать электроны.
58. Ядро какого элемента получится, если ядро $^{238}_{92}\text{U}$ потеряет 8α и 6β частиц?
59. Определите номер неизвестного изотопа в уравнении ядерной реакции:
 $^{32}_{16}\text{S} + ^2_1\text{D} \rightarrow ^1_0\text{n} + \dots$
60. Константа радиоактивного распада изотопа $^{35}_{16}\text{S}$ равна $9,2 \cdot 10^{-8} \text{ с}^{-1}$. Определите период полураспада.
61. В природной смеси кислорода атомы стабильных изотопов кислорода находятся в соотношении $^{16}\text{O} : ^{17}\text{O} : ^{18}\text{O} = 2545:1:5$. Чему равна атомная масса кислорода, если точные массовые числа изотопов равны 15,994914; 16,999133; 17,999159?
62. Определите массовое число неизвестного изотопа в ядерной реакции:
 $^{27}_{13}\text{Al} + ^4_2\text{He} \rightarrow ^{30}_{15}\text{P} + \dots$
63. Определите период полураспада изотопа, если в течение 1 часа распадается 52% начального количества атомов.
64. Рассчитайте длину связи в молекуле ICl, если межъядерные расстояния в молекулах I_2 и Cl_2 равны 2,67 и 1,99 Å.
65. Какую максимальную ковалентность проявляет бром в своих соединениях?
66. Какая из связей H-N, H-S, H-Te, H-Li наиболее полярна?
67. Какая из связей Cs-Cl, Ca-S, Ba-F наиболее приближается к ионной?
68. Электрический момент диполя молекулы SO_2 равен $5,4 \cdot 10^{-30}$ Кл·м. Определите длину диполя S-O.
69. Рассчитайте эффективные заряды атомов водорода и йода, образующих ковалентную связь, если дипольный момент молекулы HI равен $1,3 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, а длина связи H-I равна 1,61 Å.
70. В каком из соединений LiF, BeF_2 , CF_4 связь Э-F больше всего приближается к ковалентной?
71. Определите полярность молекулы HBr, если длина диполя молекулы равна 0,18 Å.

72. Каков вклад р-орбиталей атома кремния (в %) в гибридизацию молекулы SiCl_4 ?
73. Каким образом меняется значение валентного угла в ряду соединений H_2O , H_2S , H_2Se , H_2Te ?
74. Сколько электронов находится на связывающих орбиталях в молекуле F_2 ?
75. Какую пространственную конфигурацию имеют молекулы с sp^2 -гибридизацией центрального атома?
76. Каков вклад s-гибридизации (в %) в молекуле BBr_3 ?
77. Сколько р-орбиталей атома кислорода участвует в связывании в молекуле воды?
78. Сколько разрыхляющих электронов находится в молекуле кислорода?
79. Сколько несвязывающих электронов находится в молекуле CO ?
80. Рассчитайте эффективный заряд атома кальция по правилам Слэтера.
81. Определите, какой из галогенов наиболее склонен образовывать ион X^+ .
82. Определить номер группы элементов, имеющих наибольшее сродство к электрону.
83. Определить номер группы элементов, имеющих наименьшие потенциалы ионизации.
84. Как меняется число разрыхляющих электронов в ряду: NO^+ , NO , NO^- ?
85. Как меняется порядок связи в частицах: O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} ?
86. Сколько неподеленных электронных пар имеет атом селена в молекуле SeO_3 ?
87. Какой из катионов оказывает большее поляризующее действие: Li^+ или Be^{2+} ?
88. Какой из анионов больше подвергается поляризации: O^{2-} или Se^{2-} ?
89. Сколько неподеленных электронных пар принадлежит атому кислорода в молекуле POF_3 ?
90. Сколько неспаренных электронов содержит комплекс $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$?
91. Сколько несвязывающих электронов находится на молекулярных орбиталях в комплексе $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$?
92. Какой функцией описываются волновые свойства электрона в атоме?
93. Какой физический смысл имеет Ψ^2 ?
94. Что понимают под атомной орбиталью?
95. Какой смысл вкладывают в понятие s-, p-, d-электронных облаков?
96. Что такое энергетический уровень электрона в атоме?
97. С каким квантовым числом связано правило Хунда?
98. С каким квантовым числом связано второе правило Клечковского?
99. Какой смысл вкладывается в понятие орбитальный радиус?
100. Что такое эффект экранирования?
101. Что такое эффект проникновения?
102. Какую информацию дает разность электроотрицательностей двух атомов?
103. Какие существуют механизмы образования ковалентной связи?
104. Что понимают под валентностью элемента?
105. Какая зависимость существует между длиной связи и ее кратностью?
106. Сколько различных способов перекрывания s- и p-орбиталей?
107. Есть ли разница в энергии π - и σ -связей?


108. Что называется молекулярной орбиталью?
109. Каковы энергетические условия линейной комбинации атомных орбиталей в молекулярные?
110. Как меняется энергия электрона на связывающих МО в отличие от атомных?
111. Как определяется порядок связи в молекуле по методу МО?
112. Что показывают энергетические диаграммы образования молекулярных орбиталей?
113. Укажите главное отличие методов ВС и МО.
114. Укажите главное отличие ионной связи от ковалентной.
115. Приведите наиболее прочное межмолекулярное взаимодействие.
116. В чем отличие внешнеорбитальных и внутриорбитальных комплексов?
117. Какие факторы определяют тип гибридизации атомных орбиталей центрального атома?
118. С чем связана окраска комплексных соединений в растворах?

Программа составлена в соответствии с государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по специальности 020100.62 Химия профиль физическая химия.


Программу составили:

Полещук Олег Хемович д.х.н., профессор кафедры органической химии ТГПУ 

Программа утверждена на заседании кафедры органической химии ТГПУ протокол № 1 от «31» августа__2011 г.

Заведующий кафедрой органической химии  О.Х. Полещук

Рабочая программа одобрена методической комиссией биолого-химического факультета ТГПУ протокол № 7 от «2» 09 2011г.

Председатель методической комиссии БХФ  Е. П. Князева

Лист внесения изменений

Дополнения и изменения в программу учебной дисциплины «Компьютерное моделирование» на 2012-2013 учебный год

Дополнить пункт 6.3 Средства обеспечения освоения дисциплины программы следующими электронными ресурсами:

1) **Архив журнала Science**, The American Association for the Advancement of Science (AAAS) - Американская ассоциация по развитию науки - некоммерческая организация, сообщество ученых, созданное в целях поддержки науки, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 01.01.2012 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://www.sciencemag.org/content/by/year#classic>

2) **Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU**. При поддержке РФФИ. Лицензионное соглашение №916 от 12.01.2004 г. на период с 12.01.2004 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://elibrary.ru>

3) **Архив научных журналов 2011 Cambridge Journals Digital**. Издательство Cambridge University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 30.03.12 - бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://journals.cambridge.org/action/stream?pageId=3216&level=2>

4) **Архивы 169 журналов издательства Oxford University Press**. Издательство Oxford University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 14.03.12 - бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://www.oxfordjournals.org/>

5) **Цифровой архив электронных журналов издательства Taylor&Francis**. Издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Договор №316-РН-211 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://arch.neicon.ru/xmlui/>

6) **УИС Россия (Университетская информационная система РОССИЯ)**. Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова (Научно-исследовательский вычислительный центр, Экономический факультет), Автономная некоммерческая организация Центр информационных исследований (АНО ЦИИ). Письмо-заявка № 21/300 от 01.03.2010 г. на период с 01.03.2010 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** с компьютеров библиотеки ТГПУ и при индивидуальной регистрации по запросу. <http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp>

7) **БД «Марс» - сводная база данных аналитической росписи статей из периодических изданиях (архив 2001-2006)**. Ассоциация региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН). Договор № С/161-1/3 от 12.10.2009 г. на период с 12.10.2009 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. http://arbicon.ru/services/mars_analitic.html

8) **Архив журнала Nature**. Научное издательство Nature Publishing Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 27.09.12 - бессрочно. **Сумма договора:** оплата оказанных услуг производится из средств Минобрнауки. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://www.nature.com/nature/index.html>

9) **Архив 16 научных журналов издательства Wiley**. Издательство Wiley, издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 317.55.11.4002 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.13 – бессрочно. <http://onlinelibrary.wiley.com/>

10) **Архив научных журналов SAGE Journals Online**. Издательство SAGE Publications, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 05.02.2012 – бессрочно. <http://online.sagepub.com/>

11) **Архив научных журналов издательства IOP Publishing**. Издательство IOP Publishing Института физики Великобритании, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 13.04.2012 – бессрочно. <http://iopscience.iop.org/>

12) **Архив электронных журналов Electronic Back Volume Sciences Collection издательства Annual Reviews**. Издательство Annual Reviews, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. <http://www.annualreviews.org/>

13) **Электронная библиотека ТГПУ**. <http://libserv.tspu.edu.ru/>