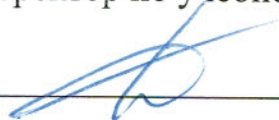


ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО ПО НАУКЕ И ОБРАЗОВАНИЮ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ТГПУ)

«Утверждаю»
Проректор по учебной работе (декан факультета)



« 10 » 10 2010 г.

ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ЕН.В.01
Квантовая химия

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 школьного курса химии 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. Требования к уровню освоения содержания дисциплины:

В курсе квантовой химии/строении вещества будущий учитель должен получить и закрепить следующие основные навыки и умения:

- владение основными принципами построения химических соединений;
- умение составить электронную формулу любой молекулы;
- проведение конкретных полуэмпирических и неэмпирических расчетов молекул и химических реакций для установления структуры и реакционной способности соединений на основе использования современных компьютерных квантово-химических программ ChemOffice, HyperChem, Gaussian98;
- понимать природу взаимодействия молекул в процессе химических реакций.

Успешное усвоение курса строения вещества требует знания следующих дисциплин:

- высшей математики;
- физики;
- вычислительной техники;
- неорганической химии;
- физической химии;
- органической химии.

3. Объем дисциплины и виды учебной работы:

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		4	5		
Общая трудоемкость дисциплины	170		170		
Аудиторные занятия	90		90		
Лекции	36		36		
Практические занятия (ПЗ)					
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	54		54		
И (или) другие виды аудиторных занятий					
Самостоятельная работа	80		80		
Курсовой проект (работа)					
Расчетно-графические работы					
Реферат					
И (или) другие виды самостоятельной работы					
Вид итогового контроля (зачет, экзамен)			зачет		

4.Содержание дисциплины.

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

№ п/п	Раздел дисциплины	Лекции	Практические занятия, семинары	Лабораторные занятия
1	2	3	4	5
	5 семестр			
1	Основные положения квантовой механики.	4		
2	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.	4		
3	Теория химической связи.	4		
4	Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул.	4		
5	Расчетные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета.	4		
6	Неэмпирические методы расчета. Неэмпирическая теория молекулярных орбиталей.	4		
7	Электрические свойства молекул. Дипольный момент. Межмолекулярное притяжение.	2		
8	Донорно-акцепторные комплексы.	4		
9	Кислоты и основания. Принцип ЖМКО.	4		
10	Теория возмущений молекулярных орбиталей.	2		
	ИТОГО	36		
1	Знакомство с программами ChemOffice, HyperChem6. Построение молекул, оптимизация структуры, методы молекулярной механики, полуэмпирические методы расчета.			12
2	Расчет электронной структуры молекул по программе GAMESS и анализ результатов.			6
3	Расчет термодинамических величин и молекулярных орбиталей полуэмпирическими методами.			4
4	Расчет ИК и УФ-спектров с использованием HyperChem6.			4
5	Знакомство с программами Gaussian98, Spartan, ADF для расчета неэмпирическими методами.			4
6	Расчет ЯМР характеристик алканов, алкенов, алкинов, ароматических соединений.			4
7	Расчет переходных состояний химических реакций.			4
8	Анализ рассчитанных спектров ИК- и Рамановских.			4
9	Расчет термодинамических параметров изодесмических реакций.			4
10	Расчет возбужденных состояний и УФ-спектров.			4
11	Анализ результатов расчета натуральных валентных орбиталей и использование растворителя.			4
	ИТОГО	36		54

4.2.Содержание разделов дисциплины

4.2.1. Постулаты квантовой механики. Соотношения неопределенностей. Вариационный метод. Теория возмущений.

- 4.2.2. 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.
- 4.2.3. 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.
- 4.2.4. 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.
- 4.2.5. Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам. Приближение нулевого дифференциального перекрытия. Инвариантность полуэмпирических методов. Параметризации методов полного пренебрежения дифференциальным перекрытием (ППДП/2, ППДП/С). Параметризация методов частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием (ЧПДП, МЧПДП/3). Методы пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрытием (АМ1, РМ3, МПДП). Метод Паризера-Парра-Попла (ППП). Расширенный метод Хюккеля.
- 4.2.6. 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.
- 4.2.7. 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.
- 4.2.8. 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.
- 4.2.9. 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.

4.2.10. Теория возмущения молекулярных орбиталей. Возмущение первого и второго порядка. Энергетические составляющие взаимодействия молекул. Граничные орбитали. 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. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

5.1. Рекомендуемая литература:

а) основная литература:

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. –М.: Соломон-Пресс -2005.
2. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие / О. Х. Полещук. - Томск: ТГПУ, 2007. - 176 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.

б) 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. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. –М.: Мир. -1976.
5. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: -Мир. –1990.
6. Симкин Б. Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М. Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов/Дон.: Феникс. -1997. -272с.

5.2. Средства обеспечения освоения дисциплины

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

6. Материально-техническое обеспечение дисциплины
Компьютерный класс

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. p-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.

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.

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 ($\mu_{\text{эксп}}$ 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: $[Pt(NH_3)_4]^{2+}$ - диамагнитный; $[PdCl_4]^{2-}$ - диамагнитный; $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$; $[AuCl_4]^-$ - диамагнитный; $[NiF_4]^-$ - парамагнитный.
14. На основе теории кристаллического поля установите, будут ли диамагнитными или парамагнитными комплексы, в которых лиганды создают сильное поле: $[Fe(CN)_6]^{4-}$; слабое поле: $[Cr(H_2O)_6]^{2+}$.

Тестовые задания

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 К?
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: $SnBr_2$, AlI_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 А.
19. Полагая, что в молекулах $AHal_2$ каждый атом галогена вносит в базисный набор по одной АО р-типа, направленной прямо к центральному атому А, 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:
 а) $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$ (плоско-квадратная структура),
 б) CoF_6^{3-} (высокоспиновый комплекс),
 в) $\text{Co}(\text{NH}_3)_6^{3+}$ (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 $3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$; $4s^2 4p^6 4d^5 5s^1$. 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, BeF₂, CF₄ связь Э-Ф больше всего приближается к ковалентной?
71. Определите полярность молекулы HBr, если длина диполя молекулы равна 0,18 Å.
72. Каков вклад p-орбиталей атома кремния (в %) в гибридизацию молекулы SiCl₄?
73. Каким образом меняется значение валентного угла в ряду соединений H₂O, H₂S, H₂Se, H₂Te?
74. Сколько электронов находится на связывающих орбиталях в молекуле F₂?
75. Какую пространственную конфигурацию имеют молекулы с sp²-гибридизацией центрального атома?
76. Каков вклад s-гибридизации (в %) в молекуле BBr₃?
77. Сколько p-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: O₂⁺, O₂, O₂⁻, O₂²⁻?
86. Сколько неподеленных электронных пар имеет атом селена в молекуле SeO₃?

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 перекрытия 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?
119. Какое главное отличие в описании природы химической связи в комплексах по методу ВС и в рамках теории кристаллического поля?
120. Одинаковой или разной будет электроотрицательность атома серы в SO_4^{2-} и SF_6 ?

1

Программа составлена в соответствии с государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по специальности 540100 Естественнонаучное образование профессионально-образовательному профилю 540101 – Химия.

Программу составили:

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

Программа утверждена на заседании кафедры органической химии ТГПУ протокол № 6 от « 28 » июня 2010 г.

Заведующий кафедрой органической химии  О.Х. Полещук

Рабочая программа одобрена методической комиссией биолого-химического факультета ТГПУ протокол № 1 от « 10 » 10 2010 г.

Председатель методической комиссии БХФ  Е. П. Князева

Согласовано:

Декан БХФ

 В. А. Дырин