

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		



УТВЕРЖДЕНО  
решением Ученого совета института  
Медицины, экологии и физической культуры  
18 мая 2022 г., протокол № 9/239

Председатель / В.И. Мидленко /  
подпись расшифровка подписи  
18 мая 2022 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина	<b>СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА</b>
Факультет	<b>Экологический</b>
Кафедра	<b>Общей и биологической химии</b>
Курс	<b>4</b>

Направление (специальность) **04.03.01 Химия**

Направленность (профиль/специализация) Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность

Форма обучения **Очная**

Дата введения в учебный процесс УлГУ: « 1 » сентября 2022 г.

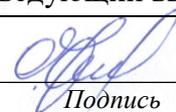
Программа актуализирована на заседании кафедры: протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Программа актуализирована на заседании кафедры: протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Программа актуализирована на заседании кафедры: протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Сведения о разработчиках:

ФИО	Кафедра	Должность, ученая степень, звание
Шроль Ольга Юрьевна	-	кандидат биологических наук, доцент

<b>СОГЛАСОВАНО</b>
Заведующий выпускающей кафедрой
(  / <u>Шроль О.Ю.</u> / Подпись ФИО <u>« 16 » мая 2022 г.</u>

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

## 1 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Целью освоения дисциплины** - является систематическое изложение закономерностей изменения свойств веществ в зависимости от строения образующих их микрочастиц и внешних условий; расширение знаний о строении вещества, полученных студентами при изучении ряда фундаментальных курсов образовательной программы; получение практических навыков расчетов свойств веществ на основании данных по их структуре и обратных задач. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о современных концепциях строения химических соединений и возможностей их использования для понимания и прогнозирования химических свойств веществ и их реакционной способности в различных условиях.

### Задачи освоения дисциплины:

- дать представление об основных современных концепциях теоретической химии;
- ознакомить с основными используемыми современными терминами, характеризующими разные аспекты строения химических соединений;
- дать представление об основных принципах познания строения химических соединений разных типов с помощью экспериментальных и расчетных методов;
- изучить связь факторов строения и среды с реакционной способностью веществ.

## 2 МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП:

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам вариативной части учебного плана, базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении предшествующих курсов (неорганическая химия, органическая химия и др.), углубляет фундаментальную естественнонаучную подготовку специалистов-химиков.

Данная дисциплина изучается на 4 курсе.

## 3 ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ), СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОПОП

Код и наименование реализуемой компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций
ПК-3: владеет системой фундаментальных химических понятий	<p><b>Знать:</b> основы современной теории химического строения; квантовые состояния молекул; симметрию молекулярных систем, их электрических и магнитных свойствах; межмолекулярных взаимодействиях; строении конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов), их поверхностей и границ разделов.</p> <p><b>Уметь:</b> ориентироваться в особенностях химического поведения различных типов и классов химических соединений, обусловленных их строением.</p> <p><b>Владеть:</b> современными представлениями о строении вещества, природе химической связи и движущих причин химических реакций</p>

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

ПК-4: способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	<p><b>Знать:</b> принципы познания строения химических соединений разных типов с помощью экспериментальных и расчетных методов.</p> <p><b>Уметь:</b> выявлять основные принципы строения химических частиц, связь между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений.</p> <p><b>Владеть:</b> навыками анализа и установления характера структуры на основе совокупности данных о физических и химических свойствах вещества, полученных экспериментальными и теоретическими методами. Уметь использовать свои знания на практике.</p>
---	--

## ОБЩАЯ ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ

**4.1. Объем дисциплины в зачетных единицах (всего) 3 ЗЕТ**

**4.2. По видам учебной работы ( в часах): 108**

Вид учебной работы	Количество часов (форма обучения - <b>очная</b> )	
	Всего по плану	В т.ч. по семестрам
1	2	8 3
Контактная работа обучающихся с преподавателем в соответствии с УП	84	84
Аудиторные занятия:	84	84
лекции	42	42
семинары и практические занятия	42	42
лабораторные работы, практикумы	0	0
Самостоятельная работа	24	24
Форма текущего контроля знаний и контроля самостоятельной работы: тестирование, контрольная работа, коллоквиум, реферат и др. (не менее 2 видов)	Тестирование, коллоквиум	Тестирование, коллоквиум
Курсовая работа	-	-
Виды промежуточной аттестации (зачет)	0	0
Всего часов по дисциплине	108	108

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

#### 4.3 Содержание дисциплины (модуля.) Распределение часов по темам и видам учебной работы:

Форма обучения: очная

Название разделов и тем	Все-го	Виды учебных занятий					Форма текущего контроля знаний
		Аудиторные занятия			Занятия в интерактивной форме	Самостоятельная работа	
		Лекции	Практические занятия, семинары	Лабораторные работы, практикумы			
Тема 1. Ведение. Основы современной теории химического строения	5	2	2	-	-	2	Тест, коллоквиум №1
Тема 2. Механическая модель молекулы. Метод потенциалов	10	4	4	-	-	4	Тест
Тема 3. Особенности квантовомеханического описания химической связи	16	8	6	-	-	4	Тест
Тема 4. Химическая связь в комплексных соединениях	12	8	4	-	-	2	Тест
Тема 5. Теоретическая оценка реакционной способности вещества.	16	8	6	-	-	4	Тест, коллоквиум №2
Тема 6. Основные результаты изучения строения молекул.	12	8	4	-	-	2	Тест
Тема 7. Строение конденсированных фаз.	11	6	4	-	-	2	Тест
Тема 8. Строение жидкостей и растворов	13	6	6	-	-	2	Тест
Тема 9. Кристаллическое состояние вещества.	13	6	6	-	-	2	Тест, коллоквиум №3
<b>ИТОГО</b>	<b>108</b>	<b>42</b>	<b>42</b>	<b>-</b>	<b>-</b>	<b>24</b>	

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

## 5 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### Тема 1. Введение. Основы современной теории химического строения

Современные представления о веществе (макротеле) как совокупности большого числа химических частиц - молекул, атомов, радикалов и т.п. Различные уровни организации вещества (субатомный, атомный, молекулярный, надмолекулярный) и агрегатные состояния (газообразное, жидкое, твердое) в их связи с внутри- и межмолекулярными взаимодействиями. Содержание понятий "строение вещества" и "структура вещества". Различные аспекты термина "строение молекул": топологический, геометрический, электронный и др. Упорядоченные и неупорядоченные структуры конденсированных фаз.

### Тема 2. Физические основы теории химической связи. Механическая модель молекулы

Метод потенциалов. Ионная связь. Расчет энергии решетки. Ковалентная связь, ее основные свойства. Металлическая связь. Модель Друде-Лоренца. Промежуточные типы химической связи. Ван-дер-Ваальсовая связь. Водородная связь. Классификация химических частиц и взаимодействий между ними.

### Тема 3. Особенности квантовомеханического описания химической связи

Природа химической связи, результат взаимного влияния атомов в химических частицах друг на друга, молекулярно-орбитальная структура. Классификация химических связей с точки зрения характера электронных взаимодействий: двухэлектронные двухцентровые (локализованные) и многоцентровые (делокализованные) связи. Координационная связь. Характерные особенности разных типов химической связи. Квантовохимические представления об электронных заселенностях атомов и связей, эффективных зарядах на атомах (сигма-, пи-, суммарных), порядках связей и т.п. Диаграммы распределения электронной плотности. Молекулярно-орбитальная структура химических соединений. Основные правила формирования МО. Граничные орбитали важнейших типов органических, неорганических, элементоорганических, координационных соединений. Экспериментальные и расчетные значения орбитальных энергий.

### Тема 4. Химическая связь в комплексных соединениях

Особенности координационной связи. Типы координационных полиэдров. Теория кристаллического поля. Расщепление d-уровней центрального иона. Количественная оценка расщеплений. Правило стереохимического ряда. Комплексы сильного и слабого полей. ТКП и магнитные свойства комплексов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Применение теории МО для описания электронного строения координационных соединений. Деформация координационных полиэдров и эффекты Яна-Теллера.

### Тема 5 Теоретическая оценка реакционной способности вещества

Статический и динамический методы. Основы статического метода (метод изолированной молекулы). Индексы реакционной способности в статическом методе. Основы динамического метода (метод локализации). Модель переходного состояния реакции. Энергии локализации атома (нуклеофильная, электрофильная, радикальная). Возможности и ограничения статического и динамического методов. Правило Хэммонда.

### Тема 6. Основные результаты изучения строения молекул

Молекулы простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Хелаты. Строение органических соединений. Полиэдраны. Фуллерены. Элементоорганические соединения. Металлоцены. Соединения включения (клатраты). Ротаксаны и катенаны. Фуллерены. Полимеры и биополимеры. Белки.

### Тема 7. Строение конденсированных фаз

Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кри-

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

сталлы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Жидкие кристаллы и другие мезофазы.

### **Тема 8. Строение жидкостей и аморфных веществ**

Современные методы описания структуры жидкостей. Специфика аморфного состояния. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Строение мезофаз. Определение мезофаз. Методы изучения их структуры. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.). Жидкокристаллическое состояние в биологических системах.

### **Тема 9. Строение кристаллов**

Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, понятие о пространственных группах симметрии кристаллов. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.

## **6 ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ И СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ**

### **Практическое занятие 1 Основы современной теории химического строения**

Вопросы к теме:

1. Геометрические характеристики, узловая структура, плотность электронного облака. Спин-орбитальное взаимодействие, его природа и влияние на состояния атомов и молекул.
2. Изомерия валентная и структурная, конформация и таутомерия.
3. Топология молекулы, цепь химического действия и топологические графы. Структурно-нежесткие молекулы.

### **Практическое занятие 2 Механическая модель молекулы. Метод потенциалов**

Вопросы к теме:

1. Орбитальная модель молекулы. Типы молекулярных орбиталей (канонические и локализованные). Гибридизация АО. Классификация МО по энергии, симметрии и узловой структуре.
2. Геометрическая форма молекул и ее определение методом ОЭПВО.
3. Топология молекулы, цепь химического действия и топологические графы. Структурно-нежесткие молекулы.

### **Практическое занятие 3 Особенности квантовомеханического описания химической связи**

Вопросы к теме:

1. Как образуется химическая связь?
2. Что означает термин «валентность»?
3. Как классифицируют химическую связь?
4. Какими количественными характеристиками описывают химическую связь?
5. Как характеризуют прочность связи?
6. Что такое «кратная» химическая связь? Как кратность связи отражается на её прочности?

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

7. Как соотносятся длина и частота колебаний связи с её прочностью?
8. Какие математические методы используют для описания связи?
9. В чём особенность метода валентных связей (МВС)?
10. Какими методами можно изучить состав и строение химических соединений?

### *Примеры описания связи в соединениях*

#### **Пример 1.**

**Распределите соединения в порядке возрастания полярности связи:  $S_2$ ,  $MgO$ ,  $HF$ ,  $CO$ .**

*Решение.*

Мерой полярности связи является разница в значениях электроотрицательностей:

	Н	С	О	С	F	Mg
ЭО	2,1	2,5	3,5	2,5	4,0	1,2

$$\Delta \text{ЭО}(S-S) = 0,0;$$

$$\Delta \text{ЭО}(Mg-O) = 3,5 - 1,2 = 2,3;$$

$$\Delta \text{ЭО}(H-F) = 4,0 - 2,1 = 1,9;$$

$$\Delta \text{ЭО}(C-O) = 3,5 - 2,5 = 1,0.$$

Следовательно, в порядке возрастания полярности связи соединения расположатся в ряд:



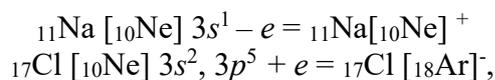
#### **Пример 2.**

**Определите тип химической связи и опишите её в соединении  $NaCl$**

*Решение.*

По  $\Delta \text{ЭО} = 3,5 - 1,0 = 2,5$  связь в соединении ионная. Ионная связь представляет собой электростатическое взаимодействие положительно и отрицательно заряженных ионов в соединении. Так как электрическое поле иона имеет сферический характер, то для ионной связи характерна ненаправленность (связь осуществляется во всех направлениях), ненасыщаемость (связь осуществляется со всеми ионами, которые могут расположиться в близлежащем пространстве определенного иона) и поляризуемость (ионные соединения легко диссоциируют в полярных растворителях).

Образование ионов обусловлено устойчивостью электронных конфигураций инертных газов:



далее связь осуществляется за счет кулоновского взаимодействия, образуя ионный кристалл

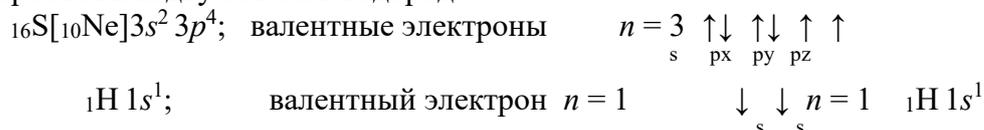
#### **Пример 3.**

**Определите характер химической связи в соединении  $H_2S$  и опишите связь в соответствии с её свойствами.**

*Решение.*

По величине  $\Delta \text{ЭО} = 2,5 - 2,1 = 0,4$  определяем химическую связи как ковалентную малополярную. Для ковалентной связи характерны насыщаемость и направленность.

В образовании связи участвуют  $p$ -орбитали атома серы, которые перекрываются с двумя  $s$ -орбиталями двух атомов водорода:



Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

Вследствие пространственной ориентации р-орбиталей атома серы молекула  $\text{H}_2\text{S}$  имеет угловую структуру (рис. 1).

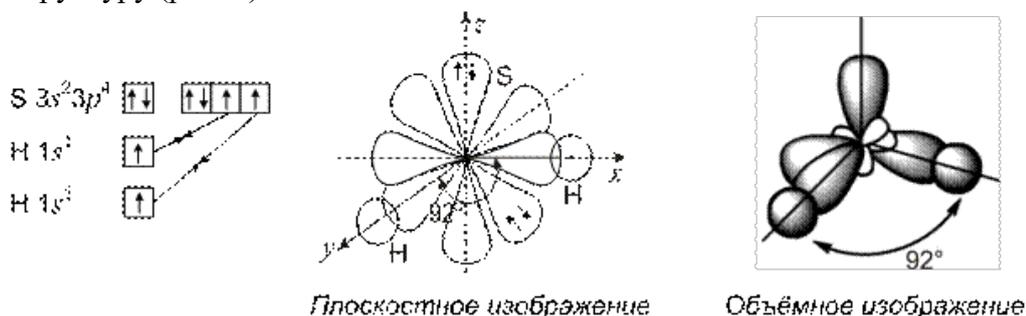


Рис. 1. Образование молекулы  $\text{H}_2\text{S}$  в небольшой степени гибридованными валентными орбиталями атома серы; валентный угол молекулы слегка расширен до  $92^\circ$

Вследствие небольших размеров атома серы, по сравнению с аналогами Se и Te, области повышенной электронной плотности сильнее отталкиваются и угол связи становится больше  $90^\circ$ .

Можно объяснить это явление  $sp^3$ -гибридизацией; две орбитали, занятые электронными парами способны к дальнейшему взаимодействию по донорно-акцепторному механизму.

### Индивидуальные задания

**Задание:** Опишите химическую связь в молекулах варианта в рамках метода ВС, выполнив последовательные действия:

- составьте электронные формулы элементов, входящих в состав молекулы;
- определите тип химической связи;
- изобразите графически валентные электроны в основном и возбужденном состоянии;
- определите тип гибридизации орбиталей (если гибридизация имеет место);
- изобразите связь с помощью ячеек;
- дайте пространственное изображение молекулы с помощью орбиталей и геометрических фигур;
- определите полярность связи и полярность молекулы;
- дайте количественную оценку углам между связями;
- укажите кратность связи;
- оцените способность молекулы к дальнейшему взаимодействию.

### Варианты заданий

Номер варианта	Соединение	Номер варианта	Соединение	Номер варианта	Соединение
1	$\text{H}_2\text{S}$ , $\text{TeF}_6$	13	$\text{MgF}_2$ , $\text{SF}_6$	25	$\text{PCl}_3$ , $\text{NCl}_3$
2	$\text{AlBr}_3$ , $\text{H}_2\text{Te}$	14	$\text{H}_2\text{Te}$ , $\text{CF}_4$	26	$\text{GaBr}_3$ , $\text{PCl}_3\text{O}$
3	$\text{GeH}_4$ , $\text{AsH}_3$	15	$\text{BI}_3$ , $\text{H}_2\text{O}$	27	$\text{CO}_2$ , $\text{GeI}_4$
4	$\text{GaI}_3$ , $\text{HCl}$	16	$\text{HBr}$ , $\text{SiF}_4$	28	$\text{CCl}_4$ , $\text{H}_2\text{O}$
5	$\text{BeBr}_2$ , $\text{SbBr}_3$	17	$\text{HF}$ , $\text{AsF}_5$	29	$\text{PCl}_3$ , $\text{SeF}_4$
6	$\text{SeF}_6$ , $\text{FeF}_2$	18	$\text{GeCl}_2$ , $\text{AlF}_3$	30	$\text{AsBr}_3$ , $\text{SBr}_6$
7	$\text{SFCl}_5$ , $\text{LiH}$	19	$\text{SbCl}_5$ , $\text{SnH}_2$	31	$\text{SO}_2$ , $\text{CoCl}_2$
8	$\text{SiCl}_2$ , $\text{GaBr}_3$	20	$\text{BBr}_3$ , $\text{PbCl}_2$	32	$\text{CO}_2$ , $\text{GeI}_4$
9	$\text{PbCl}_4$ , $\text{PbCl}_2$	21	$\text{SbI}_3$ , $\text{GaI}_3$	33	$\text{H}_2\text{Se}$ , $\text{AlI}_3$
10	$\text{SiCl}_4$ , $\text{FeCl}_2$	22	$\text{PH}_3$ , $\text{CH}_4$	34	$\text{HF}$ , $\text{SOF}_3$
11	$\text{Br}_2$ , $\text{SnH}_4$	23	$\text{NH}_3$ , $\text{GaI}_3$	35	$\text{PCl}_3\text{F}_2$ , $\text{HI}$

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

12	PF <sub>5</sub> , BeF <sub>2</sub>	24	OF <sub>2</sub> , BCl <sub>3</sub>	36	N <sub>2</sub> , NOCl
----	------------------------------------	----	------------------------------------	----	-----------------------

#### Практическое занятие 4 Описание химической связи с помощью метода молекулярных орбиталей

Вопросы к теме:

1. Почему магнитные свойства простой молекулы могут указывать на относительное энергетическое положение  $\sigma_s$ - и  $\pi_{xy}$ -связывающих МО?
2. Может ли гетероядерная связь быть неполярной?
3. Как классифицируются молекулярные орбитали по их энергии и симметрии?
4. Чем определяется относительное энергетическое положение  $\sigma_s$ - и  $\pi_{xy}$ -связывающих МО?
5. Как изменяется разность энергий  $2s$ - и  $2p$ -подуровней в атомах элементов с порядковыми номерами от трёх до десяти и сказывается ли это на относительном энергетическом положении связывающих  $\sigma$ - и  $\pi$ -МО?
6. Какая частица получится, если из молекулы Li<sub>2</sub> удалить один электрон? Какими будут магнитные свойства этой молекулы?
7. Изменится ли порядок связи в Li<sub>2</sub>, если исключить из рассмотрения внутренние электроны?
8. Используя метод МО, объясните, почему не происходит образование молекулы He<sub>2</sub>, а также – диамагнитны или парамагнитны частицы: [N<sub>2</sub>]<sup>-</sup> и [N<sub>2</sub>]<sup>+</sup>.

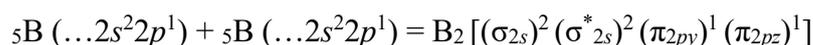
#### Примеры выполнения заданий

##### Пример 1.

Какая из молекул B<sub>2</sub> или C<sub>2</sub> характеризуется более высокой энергией диссоциации на атомы? Сопоставьте магнитные свойства этих молекул.

*Решение.*

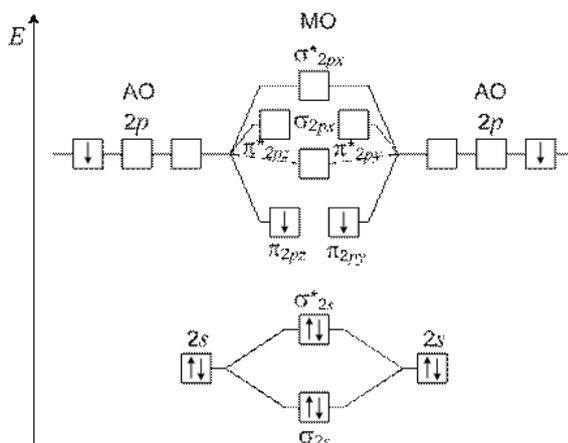
Молекула B<sub>2</sub> образуется в результате взаимодействия двух атомов бора:



На связывающих орбиталях размещены четыре электрона, на разрыхляющих – два, следовательно, порядок связи в молекуле B<sub>2</sub>  $(4 - 2)/2 = 1$ .

В молекуле B<sub>2</sub> два электрона расположены в соответствии с правилом Гунда на двух  $\pi_{2p}$ -орбиталях. Наличие двух неспаренных электронов сообщает этой молекуле парамагнитные свойства.

Энергетическая диаграмма образования молекулы B<sub>2</sub> выглядит следующим образом.



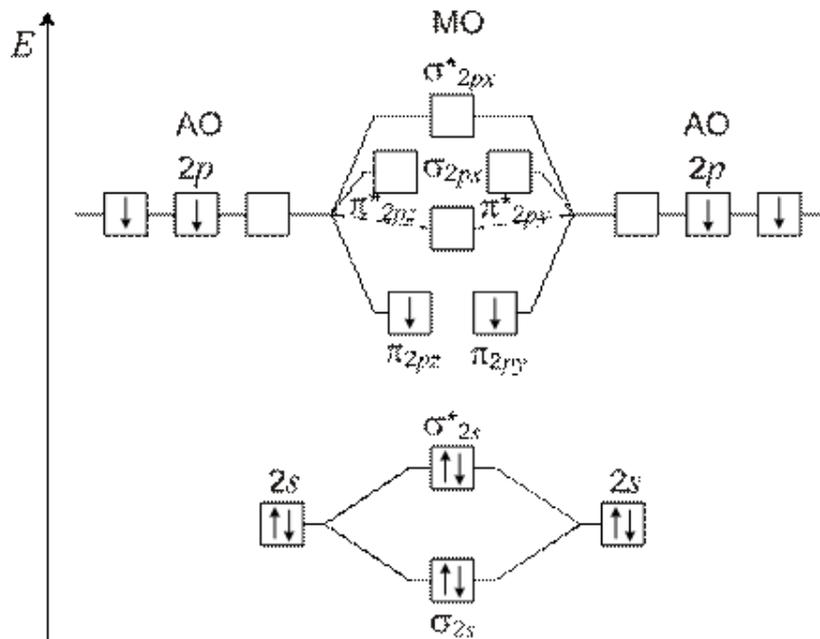
Молекула  $C_2$  образуется в результате взаимодействия двух атомов углерода:  
 ${}_6C(\dots 2s^2 2p^2) + {}_6C(\dots 2s^2 2p^2) = C_2 [(\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2]$ .

На связывающих орбиталях размещены шесть электронов, на разрыхляющих – два, следовательно, порядок связи в молекуле  $C_2$   $(6 - 2)/2 = 2$ .

В молекуле  $C_2$  все электроны спарены, следовательно, эта молекула диамагнитна.

Молекула  $C_2$ , с более высоким порядком связи, должна быть более прочной (экспериментально установленные значения энергии диссоциации на атомы молекул:  $B_2 - 276$  кДж/моль;  $C_2 - 605$  кДж/моль).

Энергетическая диаграмма образования молекулы  $C_2$ .



### Пример 2.

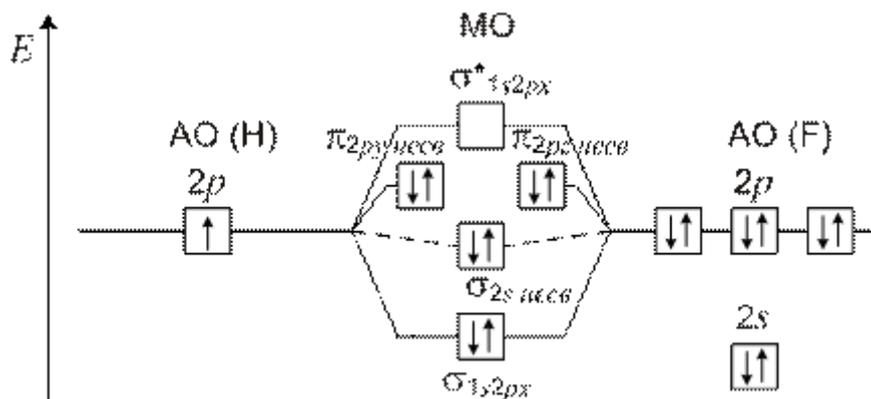
Определите порядок и полярность связи в молекуле HF, если энергия ионизации водорода составляет 13,6 эВ, а фтора – 17,42 эВ.

*Решение.*

Поскольку энергия ионизации фтора больше энергии ионизации водорода, то  $2p$ -орбитали фтора отвечают меньшему уровню энергии, чем  $1s$ -орбитали водорода. Из-за большого различия в энергиях  $1s$ -орбитали водорода и  $2s$ -орбитали фтора не комбинируются. Из-за различной симметрии относительно оси связи орбитали  $2p_y$  и  $2p_z$  атома фтора

также не комбинируются с  $1s$ -орбиталью водорода.

Таким образом,  $2s$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$ -орбитали фтора переносят без изменений в молекулу HF и считают их *несвязывающими* молекулярными орбиталями. Связывающие орбитали образуются из  $1s$ - орбитали водорода и  $2p_x$ - фтора. Энергетическая диаграмма атомных и молекулярных орбиталей представлена схемой.



Число электронов на связывающих орбиталях равно 2, на разрыхляющих – 0, следовательно, порядок связи равен 1. Электроны на несвязывающих орбиталях практически не вносят вклада в образование связи и не учитываются при оценке порядка связи.

Связывающие орбитали по энергии ближе к орбиталям более электроотрицательного атома, разрыхляющие – ближе к орбиталям менее электроотрицательного атома. Различие в энергии исходных атомных орбиталей определяет полярность связи.

Линейная молекула HF имеет большой дипольный момент. Это объясняется тем, что энергия двух электронов на связывающей  $1s2p_x$  МО ближе по энергии к соответствующей АО фтора, чем к АО водорода, а также наличием заселенных электронами несвязывающих МО в поле ядра атома фтора. Этот вывод согласуется с разностью электроотрицательностей атомов фтора и водорода.

### Индивидуальные задания

**Задание.** Опишите химическую связь в рамках ММО, выполнив следующие действия:

- 1) составьте **электронные формулы** атомов, образующих данное соединение;
- 2) изобразите **в масштабе энергетическую диаграмму** условных молекул вашего варианта, используя табличные данные об энергиях АО;
- 3) определите **порядок связи** и возможность существования данной молекулы;
- 4) объясните, **диамагнитна** или **парамагнитна** данная молекула;
- 5) пронаблюдайте есть ли смещение электронной плотности к одному из ядер, **полярна** ли молекула?

б) сделайте заключение относительно межъядерного расстояния и энергии химической связи.

7) выразите энергию МО гомоядерной бинарной молекулы на основании уравнения Шрёдингера.

### Варианты заданий

Номер варианта	Молекула	Номер варианта	Молекула	Номер варианта	Молекула
1	Cl <sub>2</sub> , LiBr	13	He <sub>2</sub> <sup>+</sup> , HO <sup>-</sup>	25	I <sub>2</sub> , NF
2	Li <sub>2</sub> , SiC	14	I <sub>2</sub> <sup>+</sup> , NS <sup>+</sup>	26	H <sub>2</sub> <sup>-</sup> , IO

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

3	$C_2^+$ , HF	15	$P_2^+$ , CN	27	$F_2$ , LiCl
4	$Cs_2^+$ , ICl	16	$Br_2^-$ , CS	28	$I_2^-$ , PN
5	$Se_2^+$ , NO	17	$S_2^-$ , $CN^+$	29	$Se_2^-$ , IBr
6	$Sn_2$ , Ti	18	$C_2^-$ , $NO^-$	30	$Te_2^+$ , IH
7	$Na_2$ , IF	19	$Rb_2^+$ , OF	31	$Xe_2^+$ , $CN^-$
8	$Tl_2$ , NS	20	$Si_2^+$ , CO	32	$P_2$ , ClO
9	$Cs_2$ , LiF	21	$Cl_2^+$ , NH	33	$Po_2$ , $CO^+$
10	$Ga_2$ , HCl	22	$Na_2^+$ , BrF	34	$At_2^+$ , $CS^+$
11	$O_2^-$ , BO	23	$P_2^+$ , LiI	35	$Kr_2^+$ , LiH
12	$N_2^-$ , $NO^+$	24	$O_2$ , $HS^+$	36	$F_2^-$ , SeO

### Практическое занятие 3 СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА В РАМКАХ ТЕОРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ И ТЕОРИИ ПОЛЯ ЛИГАНДОВ

Вопросы к теме:

1. В чём состоит особенность комплексных соединений с позиции теории химической связи?
2. Как определить заряд комплексообразователя в соединении  $K[AsClF_3]$ ?
3. Каков тип гибридизации центрального атома и геометрическая структура комплекса  $[Au(CN)_2]^-$ ?
4. Как классифицируют лиганды по энергии их взаимодействия с комплексообразователем?
5. Что такое энергия расщепления и от чего она зависит?
6. Какое число электронов на  $d$ -подуровне центрального атома обеспечивает возможность образования как высоко-, так и низкоспиновых октаэдрических комплексов?
7. Чем обусловлена окрашенность комплексных соединений? Какие из приведённых комплексов окрашены и какие бесцветны:  $[Cr(NH_3)_2(H_2O)_4]^{3+}$ ,  $[Ag(NO_2)_2]^-$ ,  $[V(SCN)_6]^{3-}$ ,  $[Ti(H_2O)_6]^{2+}$ ?
8. Чем объясняется высокая устойчивость октаэдрических низкоспиновых комплексов с конфигурацией  $d^6$ ?
9. Каким будет строение комплекса  $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$  – плоскочетырёхугольным или тетраэдрическим?
10. Какими магнитными свойствами должны обладать комплексы с центральными атомами  $d^{0-10}$  в тетраэдрическом поле лигандов?
11. Напишите формулы комплексных соединений: нитрат тетраамминмеди (II); хлорид дибромтетраамминплатины (IV); амминтетрахлороплатинат (II) калия; тетрацианоцинкат (II) тетраамминмеди (II); трихлоротриаквакобальт (III).
12. Представьте координационные формулы следующих соединений:  $CoCl_2 \cdot 4NH_3 \cdot H_2O$ ;  $2NH_4^+ \cdot Br^- \cdot CuBr_2 \cdot 2NH_3$ ;  $2Ba(OH)_2 \cdot Cu(OH)_2$ .
13. Подберите лиганды для образования катионного и анионного комплексов  $Cr^{3+}$ , с координационным числом шесть.

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

### Примеры выполнения заданий

#### Пример 1.

Определить заряд комплексообразователя в комплексном соединении  $K_4[Fe(CN)_6]$ .

*Опорная информация:* заряд иона калия +1, а цианид-иона -1.

*Решение.*

Внешняя сфера комплексного соединения состоит из четырёх катионов  $K^+$ , следовательно, её общий заряд составляет +4; заряд комплексного аниона -4; степень окисления (заряд) комплексообразователя рассчитывают как  $-4 = x + 6(-1)$ , где  $x = +2$ .

*Ответ:* заряд комплексообразователя  $Fe^{2+}$ .

#### Пример 2.

Определить тип гибридизации атомных орбиталей комплексообразователя и пространственное строение комплекса  $[HgCl_4]^{2-}$  и  $[SnF_6]^{2-}$ .

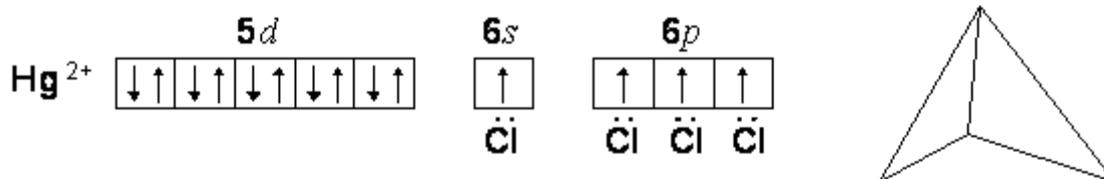
*Опорная информация:* Hg d-элемент; координационное число ртути равно четырём; заряд иона – комплексообразователя 2+; внешняя и предвнешняя электронная конфигурация иона  $Hg^{2+}$ :  $5d^{10}6s^0$ .

Sn – p-элемент; координационное число олова равно шести; заряд иона – комплексообразователя 4+; внешняя электронная конфигурация иона  $Sn^{4+}$ :  $5s^05p^05d^0$ .

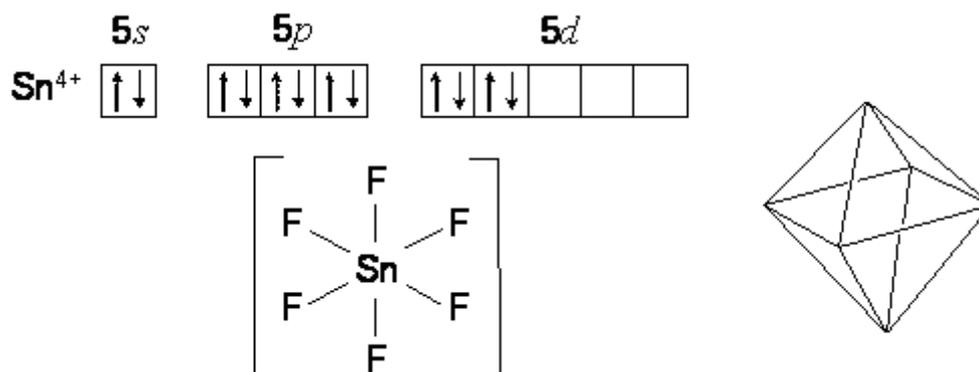
*Решение.*

Конфигурации  $nd^{10}$  и  $nd^0$  не оказывают влияния на пространственное положение лигандов и геометрическое строение комплексов может быть определено в рамках метода ВС.

Каждый из четырёх лигандов-доноров ( $Cl^-$ ) предоставляет по одной неподелённой паре электронов, а комплексообразователь – акцептор – четыре свободные атомные орбитали: одну 6s и три 6p, в состоянии гибридизации  $sp^3$ . В результате ковалентные связи направлены к вершинам тетраэдра и ион  $[HgCl_4]^{2-}$  имеет тетраэдрическую структуру:



Во втором случае шесть лигандов  $F^-(2s^22p^6)$  предоставили шесть неподелённых электронных пар и в образовании комплекса участвуют шесть атомных орбиталей с гибридизацией  $sp^3d^2$ . Пространственная конфигурация комплекса становится октаэдрической:



*Ответ:* тип гибридизации  $Hg^{2+} - sp^3$ ; структура комплекса – тетраэдр.

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

Тип гибридизации  $\text{Sn}^{4+} - sp^3d^2$  (внешняя); структура комплекса – октаэдр.

### Пример 3.

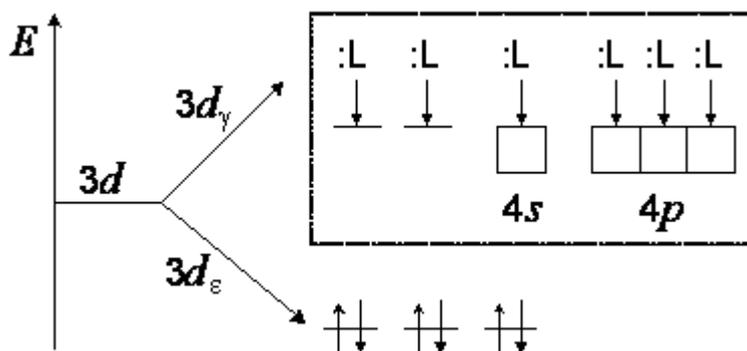
Составить энергетическую диаграмму образования связей в соединении  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ , указать тип гибридизации орбиталей центрального атома и оценить магнитные свойства комплексного соединения.

Опорная информация:  $\text{CN}^-$  – ион относится к монодентатным лигандам, создающим сильное поле; электронная конфигурация иона-комплексобразователя:  $\text{Fe}^{3+} - 3d^54s^04p^04d^0$ .

*Решение.*

Лиганды образуют шесть  $\sigma$ -связей, предоставляя неподелённые электронные пары на свободные атомные орбитали центрального иона  $\text{Fe}^{3+}$ . Кристаллическое поле шести лигандов переводит в возбуждённое состояние  $d$ -электроны комплексобразователя. Происходит снятие вырождения  $d$ -АО комплексобразователя и образуется высокоспиновый дублет  $d\gamma$ -АО и низкоспиновый триплет  $d\varepsilon$ -АО.

Энергетическая диаграмма выглядит следующим образом:



Под действием сильного поля лигандов пять  $3d$ -электронов полностью распределяются на  $3d\varepsilon$ -орбиталях; свободные  $3d$ ,  $4s$ ,  $4p$ -орбитали подвергаются гибридизации типа  $d^2sp^3$  и обуславливают октаэдрическую пространственную структуру комплекса. Комплекс находится в низкоспиновом состоянии, на  $3d\varepsilon$ -орбитали имеется один электрон, следовательно комплекс является парамагнетиком.

*Ответ:* тип гибридизации:  $\text{Fe}^{3+} - d^2sp^3$ ; структура комплекса – октаэдр; парамагнетик.

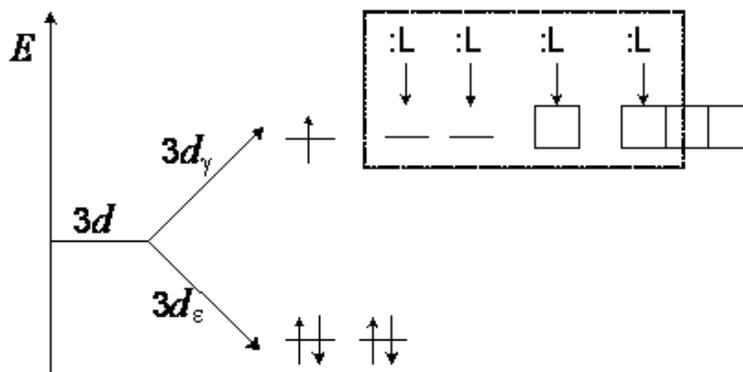
### Пример 4.

Составить энергетическую диаграмму образования связей в соединении  $[\text{CrF}_4]^-$ , указать тип гибридизации орбиталей центрального атома и оценить магнитные свойства комплексного соединения.

Опорная информация:  $\text{F}^-$  – ион относится к монодентатным лигандам, создающим слабое поле; электронная конфигурация иона-комплексобразователя:  $\text{Cr}^{3+} - 3d^34s^04p^04d^0$

*Решение.*

Под действием слабого поля четырёх лигандов, образующиеся  $\sigma$ -связи располагаются в виде тетраэдра. Энергетическая диаграмма тетраэдрического поля:



В образовании связи с лигандами участвуют свободные две  $3d$ -, одна  $4s$ - и одна  $4p$ -орбитали с гибридизацией типа  $d^2sp$ . Образуется высокоспиновый комплекс тетраэдрической конфигурации. Наличие неспаренных электронов делает комплекс парамагнитным.

Ответ: тип гибридизации  $d^2sp$ ; комплекс парамагнитный.

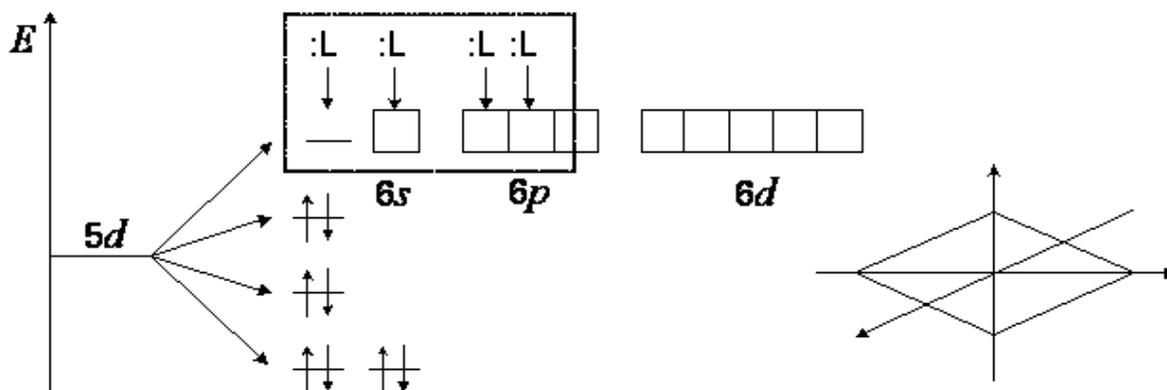
### Пример 5.

Составить энергетическую диаграмму образования связей в соединении  $[\text{Au}(\text{NH}_3)_4]^{3+}$ , указать тип гибридизации орбиталей центрального атома и оценить магнитные свойства комплексного соединения.

*Опорная информация:* комплексообразователь  $d$ -элемент; электронная конфигурация иона  $\text{Au}^{3+}$ :  $5d^86s^06p^06d^0$ ; лиганды монодентатны и для  $5d$ -элемента создают сильное поле.

*Решение.*

Энергетическая диаграмма комплексного соединения



Четыре лиганда образуют четыре  $\sigma$ -связи, создают сильное поле и реализуют плоскоквадратное расщепление орбиталей. Происходит гибридизация атомных орбиталей комплексообразователя типа  $dsp^2$ . Комплекс является низкоспиновым и диамагнитным (неспаренные электроны отсутствуют).

Ответ: тип гибридизации  $dsp^2$ ; комплекс диамагнитен.

### Индивидуальные задания

1. Определите для комплексного соединения вашего варианта:

- составные части этого соединения (внешнюю и внутреннюю координационные сферы, комплексообразователь, лиганды);
- заряд комплексного иона и заряд комплексообразователя;
- тип гибридизации орбиталей комплексообразователя;
- пространственную конфигурацию валентных орбиталей;
- тип расщепления валентных орбиталей, каким является комплекс: низко- или высоко-

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

КОСПИНОВЫМ;

- е) магнитные свойства комплексного соединения;  
ж) окрашен или бесцветен комплекс.

**2. Составьте энергетическую диаграмму образования связей в комплексном соединении.**

### Варианты заданий

Вариант	Соединение	Вариант	Соединение	Вариант	Соединение
1	$\text{Li}_3[\text{Cr}(\text{NSC})_6]$	11	$\text{Na}_2[\text{Zr}(\text{OH})_6]$	21	$\text{K}_2[\text{WS}_4]$
2	$[\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_3$	12	$(\text{NH}_4)_2[\text{MnBr}_4]$	22	$\text{K}_2[\text{Re}(\text{NSC})_6]$
3	$\text{Na}_3[\text{MnCl}_6]$	13	$\text{Ca}[\text{FeCl}_4]_2$	23	$[\text{W}(\text{CO})_6]$
4	$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_2]$	14	$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$	24	$[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{SO}_4$
5	$\text{Na}_2[\text{TiF}_6]$	15	$[\text{V}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{Br}_2$	25	$\text{Li}_2[\text{Pb}(\text{NO}_2)_4]$
6	$[\text{Pb}(\text{H}_2\text{O})_4]\text{SO}_4$	16	$\text{Li}_2[\text{FeCl}_4]$	26	$[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_3$
7	$\text{K}_2[\text{Pt}(\text{NO}_2)_4]$	17	$[\text{Pb}(\text{NH}_3)_2\text{Br}_2]$	27	$\text{Fe}[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})(\text{CN})_5]$
8	$\text{K}_2[\text{Ni}(\text{CN})_4](\text{сильн.})$	18	$[\text{Ir}(\text{CO})_2\text{I}_2]$	28	$\text{K}_2[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Br}]$
9	$\text{Na}_2[\text{Rb}(\text{CO})\text{Cl}_5]$	19	$[\text{Ni}(\text{CO})_4](\text{слаб.})$	29	$\text{Na}[\text{Pt}(\text{NH}_3)_3\text{Cl}_3]$
10	$\text{Li}_2[\text{OsF}_6]$	20	$\text{Na}_2[\text{MnCl}_4]$	30	$\text{Ca}[\text{NiBr}_4]$

### Практическое занятие 6 КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Вопросы к теме:

1. В каком порядке следует расположить комплексные соединения по возрастанию их устойчивости:  $[\text{AlF}_6]^{3-}$   $K_{\text{н}} = 1,44 \cdot 10^{-20}$ ;  $[\text{AgCl}_2]^-$   $K_{\text{н}} = 1,7610^{-5}$ ;  $[\text{HgCl}_4]^{2-}$   $K_{\text{н}} = 8,50 \cdot 10^{-16}$ ?

2. Произойдёт ли разрушение комплексного соединения  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]\text{Cl}$  при добавлении к его раствору растворов  $\text{KI}$ ,  $\text{NaOH}$ ?

$$(K_{\text{н}}([\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+) = 9,3 \cdot 10^{-8}; \quad K_{\text{с}}(\text{AgI}) = 1,7 \cdot 10^{-16}; \\ K_{\text{б}}(\text{NH}_3 \square \text{H}_2\text{O}) = 1,75 \cdot 10^{-5}; \quad K_{\text{с}}(\text{AgOH}) = 1,5 \cdot 10^{-8}).$$

### Экспериментальная часть

**Опыт 1. Получение комплексных анионов**

**Приборы и реактивы:** две пробирки, штатив для пробирок;  $\text{AgNO}_{3(\text{в})}$ ,  $\text{ZnCl}_{2(\text{в})}$ ,  $\text{KI}_{(\text{в})}$ ,  $\text{NaOH}_{(\text{в})}$ .

**Порядок выполнения опыта:** пронумеруйте пробирки и поместите в первую пробирку (№ 1) 3–5 капель раствора нитрата серебра –  $\text{AgNO}_{3(\text{в})}$ , во вторую (№ 2) – 3–5 капель раствора хлорида цинка –  $\text{ZnCl}_{2(\text{в})}$ . В первую пробирку по каплям добавляйте раствор иодида калия –  $\text{KI}_{(\text{в})}$  до растворения появившегося осадка; во вторую пробирку добавляйте по каплям раствор едкого натра –  $\text{NaOH}_{(\text{в})}$  (если осадок не образовался, прекратите добавлять щёлочь и добавляйте  $\text{ZnCl}_{2(\text{в})}$  до его образования, а затем опять добавляйте щёлочь). Опишите наблюдения и составьте уравнения реакций в молекулярной и краткой ионной форме.

**Растворы сохраните для опыта 3.**

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

### **Опыт 2. Получение комплексных катионов**

**Приборы и реактивы:** две пробирки, штатив для пробирок;  $\text{AgNO}_3(\text{в})$ ,  $\text{CuCl}_2(\text{в})$ ,  $\text{KCl}(\text{в})$ ,  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}(\text{в})$ ,  $\text{NaOH}(\text{в})$ .

**Порядок выполнения опыта:** поместите в пробирку (№ 3) 3–5 капель раствора нитрата серебра –  $\text{AgNO}_3(\text{в})$ , и добавьте несколько капель раствора хлорида калия –  $\text{KCl}(\text{в})$ , в другую пробирку (№4) – 3–5 капель раствора хлорида меди –  $\text{CuCl}_2(\text{в})$  и добавьте по каплям раствор  $\text{NaOH}(\text{в})$ . На полученные осадки подействуйте раствором аммиака до их растворения. Опишите наблюдения и составьте уравнения реакций в молекулярной и краткой ионной форме.

**Растворы сохраните для опыта 3.**

### **Опыт 3. Исследование устойчивости комплексных ионов.**

**Приборы и реактивы:** пробирки с растворами комплексных ионов №№ 1,2,3,4; чистая пробирка,  $\text{H}_2\text{O}(\text{дист.})$ ,  $\text{HNO}_3(\text{в})$ ,  $\text{NaOH}(\text{в})$ ,  $\text{Na}_2\text{S}(\text{в})$ , (или  $(\text{NH}_4)_2\text{S}(\text{в})$ ).

**Порядок выполнения опыта:** в пробирки № 1 и № 2 добавьте по каплям  $\text{H}_2\text{O}(\text{дист.})$ , наблюдайте происходящие изменения.

К раствору в пробирке № 3 добавьте по каплям азотную кислоту  $\text{HNO}_3(\text{в})$  до появления белого осадка.

Содержимое пробирки №4 разделите на две части. К одной части прилейте по каплям раствор  $\text{NaOH}(\text{в})$ , к другой – раствор  $\text{Na}_2\text{S}(\text{в})$ , или  $(\text{NH}_4)_2\text{S}(\text{в})$ . Опишите наблюдения. Составьте уравнения реакций в молекулярной и ионной форме. Сделайте **общий вывод**, в котором следует отразить:

- характер комплексных ионов, полученных в опытах 1 и 2;
- диссоциацию этих ионов, влияние добавления воды и азотной кислоты;
- причину появления осадков в пробирках № 3 и № 4, сопоставив величины констант нестойкости и констант растворимости (табл. 1).

Таблица 1

#### **Значения констант нестойкости и констант растворимости некоторых соединений**

Комплексный ион	$K_n$	Соединение	$K_s$
$[\text{AgI}_2]^-$	$5,495 \cdot 10^{11}$	$\text{AgCl}$	$1,78 \cdot 10^{-10}$
$[\text{AgI}_4]^{3-}$	$1,259 \cdot 10^{13}$	$\text{AgI}$	$8,3 \cdot 10^{-17}$
$[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$	$5,012 \cdot 10^{17}$	$\text{Zn}(\text{OH})_2$	$1,2 \cdot 10^{-17}$
		$\text{Cu}(\text{OH})_2$	$2,2 \cdot 10^{-20}$
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	$1,698 \cdot 10^7$	$\text{ZnS}$	$2,5 \cdot 10^{-22}$
		$\text{CuS}$	$6,3 \cdot 10^{-36}$
$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	$7,943 \cdot 10^8$	$\text{Ag}_2\text{S}$	$2,0 \cdot 10^{-50}$

Представьте на подпись отчёт, оформленный в следующем порядке:

- 1) название опыта;
- 2) приборы и реактивы;
- 3) наблюдения;
- 4) уравнения реакций;
- 5) общий вывод к опытам 1, 2, 3.

**Практическое занятие 7** МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИЛЫ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

Вопросы к теме:

1. Какие три вида межмолекулярных взаимодействий называют вандерваальсовыми силами? Какое взаимодействие является наиболее слабым?
2. Какой вид межмолекулярного взаимодействия является универсальным и действует между любыми частицами?
3. Какие виды межмолекулярного взаимодействия наблюдаются в системе полярных молекул?
4. Выберите соединения (атомы), неспособные к ориентационному и индукционному взаимодействию:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{He}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{Xe}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ .

### Примеры выполнения заданий

#### Пример 1.

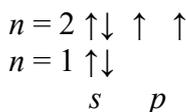
Какой тип кристаллической решётки характерен для твёрдых простых веществ, образованных элементами с порядковыми номерами 6, 10, 22?

Опорная информация: положение элемента в ПС Д.И. Менделеева; таблица электроотрицательностей элементов.

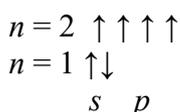
*Решение.*

По порядковому номеру определяем элемент в ПС и составляем электронную формулу.

${}_6\text{C } 1s^2 2s^2 2p^2$  – на внешнем энергетическом уровне 4  $e$  – типичный неметаллический элемент:

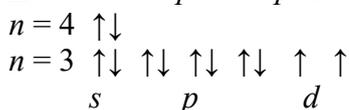


${}_6\text{C}$  – в возбуждённом состоянии, предшествующем образованию химической связи, электроны распределяются по всем внешним орбиталиям в соответствии с правилом Гунда:



${}_{10}\text{Ne } 1s^2 2s^2 2p^6$  – внешние орбитали полностью заполнены электронами; инертный элемент, не обладающий химической активностью.

${}_{22}\text{Ti } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$  – на внешнем уровне 2  $e$  – металлический элемент:



При образовании кристаллической решётки  $C_{алм}$  между атомами углерода возникают ковалентные связи. Каждый атом углерода предоставляет по четыре электрона на образование четырёх ковалентных связей с четырьмя соседними атомами углерода, причём атомные электронные орбитали находятся в состоянии  $sp^3$ -гибридизации. Тип кристалла ковалентный. Вещество характеризуется высокой температурой плавления, твёрдостью и прочностью, является диэлектриком, так как не располагает свободными носителями зарядов.

При образовании кристаллической решётки  $\text{Ne}_{(т)}$  ковалентных связей не образуется, так как внешний энергетический уровень полностью заполнен спаренными электронами. При образовании химической связи в кристалле атомы неона связываются друг с другом

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

слабыми *силами межмолекулярных взаимодействий (силы Ван-дер-Ваальса)*. Образуется молекулярный кристалл. Для него характерна низкая энергия кристаллической решётки, малая механическая прочность, низкая температура плавления. Такие твёрдые вещества способны возгоняться и являются диэлектриками.

В кристалле титана между атомами, имеющими на внешнем валентном уровне два электрона, возникает металлический тип химической связи. Энергия кристаллической решётки ниже энергии решётки ковалентных кристаллов, но значительно выше, чем у молекулярных кристаллов. Такие кристаллы обладают высокими тепло- и электропроводностью, способны деформироваться без разрушения, обладают характерным металлическим блеском, имеют высокую механическую прочность и температуру плавления.

### Пример 2.

Для системы Kr – HCl (криптон – хлороводород) необходимо:

- определить полярность каждого вещества;
- указать возможные виды межмолекулярных взаимодействий;
- дать краткую характеристику каждого вида.

*Опорная информация:* значение величин электроотрицательностей элементов и полярности связи в молекулах:

$$\text{ЭО (Kr)} = 0,00 ; \text{ЭО (H)} = 2,15 ; \text{ЭО (Cl)} = 3,16;$$

$$\Delta\text{ЭО (H-Cl)} = 3,16 - 2,15 = 1,01 - \text{полярная ковалентная связь.}$$

### Решение.

Инертный газ криптон имеет завершённую электронную оболочку, его собственный дипольный момент равен нулю. Хлороводород – полярное соединение. Дипольный момент равен  $3,47 \cdot 10^{-30}$  Кл/моль, электронная плотность смещена в сторону хлора.

Криптон способен только к одному виду межмолекулярных взаимодействий – *дисперсионному*, которое проявляется между атомами Kr – Kr; полярные соединения способны ко всем видам межмолекулярных взаимодействий, и между молекулами хлороводорода возникают *ориентационные* взаимодействия HCl – HCl, но в паре с криптоном Kr – HCl ориентационные силы не проявляются – возможен *индукционный* и *дисперсионный* эффекты.

Средняя энергия *ориентационного* взаимодействия двух молекул с дипольными моментами  $\mu_1$  и  $\mu_2$  при температуре  $T$  определяется формулой

$$U_1 = -2/3 [\mu_1^2 \mu_2^2 / (4\pi \epsilon_0)^2] (1/R^6) (1/kT),$$

где  $R$  – расстояние между диполями,  $k$  – постоянная Больцмана.

Величина *индуцированного* эффекта зависит как от величины постоянного дипольного момента полярной молекулы HCl ( $\mu_1$ ), так и от поляризуемости Kr ( $\mu_2$ ), то есть способности атомов к образованию диполя под воздействием электрического поля. Средняя энергия такого взаимодействия равна:

$$U_2 = -2 [\mu_1^2 / (16\pi^2 \epsilon_0) (\alpha_2/R^6)],$$

поляризуемость ( $\alpha$ ) криптона по справочным данным составляет  $2,430 \cdot 10^{-30}$  м<sup>3</sup>, зная расстояние между диполями  $R$ , можно определить энергию индуцированного эффекта.

Энергия *дисперсионного* взаимодействия пропорциональна поляризуемости молекул

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

и растёт с увеличением их размера. Первое приближение для энергии взаимодействия даёт формула Лондона:

$$U_3 = - \left( \frac{1}{16\pi^2} \right) \left( \frac{3I_1 I_2}{2(I_1 + I_2)} \right) \left( \frac{\alpha_1 \alpha_2}{R^6} \right),$$

где  $I_1$  и  $I_2$  – потенциалы ионизации молекул 1 и 2. По справочным данным величина  $I$  (Кг) =  $4,10 \cdot 10^2$  кДж/моль, а  $I$  (HCl) =  $12,30 \cdot 10^2$  кДж/моль, при известном значении  $R$  рассчитывают силу ориентационного взаимодействия.

### Пример 3.

Рассчитайте суммарный вклад сил Ван-дер-Ваальса при взаимодействии соединения  $C_6H_6$  в конденсированной фазе.

*Опорная информация:* формулы расчёта межмолекулярных сил взаимодействия для полярных, малополярных и неполярных молекул:

$$U_1 = -2/3 [\mu_1^2 \mu_2^2 / (4\pi \epsilon_0)^2] (1/R^6) (1/kT);$$

$$U_2 = -2 [\mu_1^2 / (16\pi^2 \epsilon_0) (\alpha_2/R^6)];$$

$$U_3 = - \left( \frac{1}{16\pi^2} \right) \left( \frac{3I_1 I_2}{2(I_1 + I_2)} \right) \left( \frac{\alpha_1 \alpha_2}{R^6} \right),$$

где  $I_1$  и  $I_2$  – потенциалы ионизации взаимодействующих молекул;  $\mu_i$  – величина дипольного момента в первом приближении, пропорциональная напряжённости электрического поля  $E$ :

$$\mu_i = \alpha \epsilon_0 E,$$

где  $\alpha$  – коэффициент поляризуемости,  $[\alpha] = \text{м}^3$ ;  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная, в СИ равная:

$$\epsilon_0 = (\mu_0 c^2)^{-1};$$

$$\epsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}, (1 \text{ Ф} = 9 \cdot 10^9 \text{ м});$$

$$\dim \epsilon_0 = \text{L}^{-3} \text{M}^{-1} \text{T}^4 \text{I}^2$$

$\mu_0$  – магнитная постоянная  $12,566370614 \cdot 10^{-7} \text{ Н/А}$ ,  $c$  – скорость света в вакууме  $299792458 \text{ м/с}$ ;  $R$  – расстояние между диполями в нм;  $k$  – постоянная Больцмана  $1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$ .

*Решение.*

Молекула бензола представляет собой плоский шестиугольник с углами  $120^\circ$  и расстоянием между атомами углерода  $r = 0,139 \text{ нм}$ . Дипольный момент молекулы  $C_6H_6$  равен нулю. Взаимодействие в конденсированной фазе определится только *дисперсионными силами*.

Формула Лондона для расчёта энергии взаимодействия

$$U_3 = - \left( \frac{1}{16\pi^2} \right) \left( \frac{3I_1 I_2}{2(I_1 + I_2)} \right) \left( \frac{\alpha_1 \alpha_2}{R^6} \right),$$

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

где  $I_1 = I_2$  и  $\alpha_1 = \alpha_2$ .  $I = 9,245$  эВ;  $\alpha = 10,4 \cdot 10^{-30}$  м<sup>3</sup>;  $R \approx 2r = 0,278$  нм.

$$U_3 = - \frac{3I\alpha^2}{16\pi^2 R^6};$$

$$U_3 = - \left( \frac{3(9,245 \cdot 10^2)(10,4 \cdot 10^{-30})^2}{64(3,1416)^2(0,278 \cdot 10^{-9})^6} \right) = - \frac{2773,5 \cdot 108,16 \cdot 10^{-60}}{64 \cdot 9,86965 \cdot 4,16 \cdot 10^{-58}} =$$

$$= - \frac{0,299982 \cdot 10^{-54}}{0,291575 \cdot 10^{-54}} = -1,0288 \text{ кДж/моль.}$$

Ответ:  $U_3 = -1,029$  кДж/моль; знак (-) отражает уменьшение энергии системы при переходе вещества в конденсированное состояние.

### Индивидуальные задания

**Задание 1.** Определить, какие связи имеются в кристаллах, образованных элементами (А, В, С) с порядковыми номерами вашего варианта. Какие свойства характерны для этих кристаллов?

#### Варианты заданий

Варианты	А	В	С	Варианты	А	В	С	Варианты	А	В	С
1	14	22	37	11	41	38	51	21	20	36	73
2	36	19	32	12	16	20	42	22	48	42	1
3	1	3	14	13	12	33	47	23	32	40	53
4	40	2	82	14	4	53	74	24	22	31	48
5	6	37	53	15	27	35	54	25	27	42	75
6	7	28	21	16	15	42	51	26	34	43	72
7	23	31	37	17	16	43	3	27	15	35	50
8	24	14	34	18	12	26	52	28	7	32	81
9	21	39	82	19	5	27	46	29	8	33	41
10	25	44	80	20	11	29	73	30	9	16	78

**Задание 2.** Для системы из молекул вашего варианта:

- определите полярность каждой молекулы;
- укажите возможные виды межмолекулярного взаимодействия;
- дайте краткую характеристику каждого вида;
- рассчитайте суммарную энергию межмолекулярного взаимодействия.

#### Варианты систем соединений

Вариант	Система	Вариант	Система	Вариант	Система
1	CH <sub>4</sub> -CH <sub>3</sub> Cl	12	NCl <sub>3</sub>	23	Ar - H <sub>2</sub> O
2	HBr - Ar	13	AsH <sub>3</sub> - Ar	24	FeCl <sub>2</sub>

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

3	MgCl <sub>2</sub>	14	CO	25	GaF <sub>3</sub>
4	H <sub>2</sub> O – He	15	GeCl <sub>4</sub> -AsCl <sub>3</sub>	26	NaBr-NaI
5	SbI <sub>3</sub> – Cl <sub>4</sub>	16	BF <sub>3</sub> – H <sub>2</sub> O	27	H <sub>2</sub> O – NF <sub>3</sub>
6	KBr	17	LiI	28	Li <sub>2</sub> – LiCl
7	HCl – Cl <sub>2</sub>	18	H <sub>2</sub> S – S <sub>2</sub>	29	PCl <sub>3</sub>
8	NO	19	CH <sub>4</sub> – CH <sub>3</sub> Br	30	H <sub>2</sub> Se – N <sub>2</sub>
9	K <sub>2</sub> S – Ne	20	F <sub>2</sub> O	31	CoCl <sub>2</sub>
10	CO <sub>2</sub>	21	NaI	32	CO <sub>2</sub> – H <sub>2</sub> O
11	SF <sub>2</sub>	22	CdF <sub>2</sub> – Kr	33	NH <sub>3</sub>

**Задание 3.** Рассчитайте суммарный вклад сил Ван-дер-Ваальса при взаимодействии соединений в конденсированной фазе.

#### Варианты соединений, образующих конденсированную фазу

Вариант	Соединение	Вариант	Соединение	Вариант	Соединение
1	H <sub>2</sub>	12	NO	23	F <sub>2</sub>
2	Br <sub>2</sub>	13	O <sub>2</sub>	24	Se <sub>n</sub>
3	CO	14	As <sub>2</sub>	25	C <sub>n</sub>
4	CO <sub>2</sub>	15	CH <sub>4</sub>	26	Si <sub>n</sub>
5	Cl <sub>2</sub>	16	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	27	I <sub>2</sub>
6	HBr	17	AsH <sub>3</sub>	28	O <sub>3</sub>
7	HCl	18	NO <sub>2</sub>	29	CF <sub>4</sub>
8	HI	19	SiO <sub>2</sub>	30	SO <sub>3</sub>
9	H <sub>2</sub> O	20	SiH <sub>4</sub>	31	NH <sub>3</sub>
10	N <sub>2</sub>	21	PH <sub>3</sub>	32	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> COO C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
11	NF <sub>3</sub>	22	SO <sub>2</sub>	33	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH

$$U_1 = - (2/3) \mu \mu / kT R^6 .$$

\* Число π-связей в элементарной ячейке кристаллической решётки.

#### Практическое занятие 8 ЗОННАЯ ТЕОРИЯ КРИСТАЛЛОВ И МАКРОСВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

Вопросы к теме:

1. Как классифицируют твёрдые вещества по величине электропроводности?
2. Как зонная теория твёрдого тела объясняет явление проводимости полупроводников?
3. Что характеризует функция Ферми–Дирака?
4. Как реализуется примесная проводимость *n*-типа?
5. Как реализуется проводимость *p*-типа?
6. Какие полупроводники обладают собственной проводимостью?
7. Какие факторы приводят к появлению электропроводности?
8. Что такое донорные атомы?
9. Какие атомы являются акцепторами?
10. Как реализуется примесная проводимость?

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

### Примеры выполнения заданий

#### Пример 1.

Определить вероятность заполнения электронами зоны проводимости при комнатной температуре для алмаза.

*Опорные данные:* ширина запрещённой зоны алмаза  $E_g = 5,5$  эВ; при  $T = 298$  К величина  $kT = 0,026$  эВ.

*Решение.*

Вероятность заполнения дна зоны проводимости:

$$\omega(E_c) = \left[ \exp\left(\frac{E_c - (E_c - E_g/2)}{kT}\right) + 1 \right]^{-1} = \left[ \exp(E_g/2kT) + 1 \right]^{-1};$$

$$\omega(E_c) \cong e^{-5,5/0,052} \cong e^{-100} \cong 5 \cdot 10^{-45}.$$

*Ответ:* маловероятно, чтобы электроны имели энергию, достаточную для перехода в зону проводимости при комнатной температуре.

#### Пример 2\*.

Опишите отличия структур кристаллов  $\text{Ca}_{(т)}$  и  $\text{F}_{2(т)}$  от структуры кристалла  $\text{CaF}_{2(т)}$ . Какие свойства характерны для этих веществ в кристаллическом состоянии?

*Опорная информация:* положение элемента в ПС Д.И. Менделеева; таблица электроотрицательностей элементов

*Решение.*

Кальций – типичный металлический элемент, на внешнем энергетическом уровне которого  $2s$ -электрон; образует металлическую кристаллическую структуру. В виде простого вещества обладает металлическим блеском, электро- и теплопроводностью, пластичен.

Фтор – типичный неметаллический элемент, на внешнем энергетическом уровне имеет только один неспаренный электрон, образующий с другим атомом фтора ковалентную связь. Простое вещество –  $\text{F}_2$ .

Образование кристалла  $\text{F}_{2(т)}$  возможно только за счёт сил межмолекулярного взаимодействия. Кристалл непрочен, легко возгоняется, характеризуется низкой температурой плавления, диэлектрик.

При образовании кристалла  $\text{CaF}_{2(т)}$  между атомами Ca и F образуется ионная связь, так как разница в значениях величин электроотрицательности очень велика:  $\Delta\chi = 3,0$ . Это приводит к образованию *ионного* кристалла. Вещество растворимо в полярных растворителях, При обычных условиях относится к классу диэлектриков, но при повышении температуры усиливаются точечные дефекты кристалла: за счёт теплового движения ионы покидают узлы кристаллической решётки и переходят в междоузлия или на поверхность кристалла. В электрическом поле возникает направленное перемещение ионов в вакансии, образованные ушедшим ионом. Возникает *ионная проводимость* кристалла.

#### Пример 3.

Охарактеризуйте полупроводниковые свойства кристалла Si и изменение этих свойств, вызванное содержанием примеси Tl и Bi:

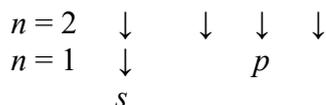
*Опорная информация:* положения зонной теории кристаллов.

*Решение.*

Распределение электронов по энергетическим уровням атома кремния выглядит следующим образом:  ${}_{14}\text{Si} [{}_{10}\text{Ne}] 3s^2 3p^2$ :

$$n^* = 3 \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$$

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		



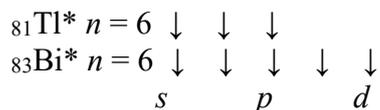
При возбуждении (обозначено \*) один электрон переходит на  $3p$ -подуровень и у атома Si появляется 4 неспаренных электрона. Кремний – типичный неметалл.

При образовании кристалла Si образуется  $N$  молекулярных орбиталей (МО). Две трети МО занимают валентные электроны – по два электрона на каждой МО, образуя валентную зону. Свободные от электронов МО образуют зону проводимости. Эти МО характеризуются более высоким уровнем энергии.

При передаче кристаллу  $Si_{(T)}$  внешней энергии (нагревание, облучение светом с  $h\nu > E_3$ ), часть валентных электронов покидает валентную зону, переходит в зону проводимости, а на их месте образуется вакансия – дырка (+). Когда кристалл кремния помещают в электрическое поле, к аноду (+) наблюдается дрейф электронов, к катоду (-) дрейф дырок (вакансий).

Таким образом реализуется *собственная электронно-дырочная проводимость* кристаллического кремния.

Электронные конфигурации *примесных* атомов в возбуждённом состоянии:



При нахождении в кристалле кремния атома таллия в узле кристаллической решётки, где находится атом таллия, наблюдается *дефицит* одного электрона в ковалентной связи с атомом кремния. При передаче кристаллу энергии небольшой величины, атом таллия захватывает недостающий электрон с близлежащей ковалентной связи и на месте захваченного электрона образуется вакансия (+) – дырка. Если такой кристалл поместить в электрическое поле, то дырка становится носителем зарядов. Атом таллия является *акцептором* электронов и усиливает в кристалле кремния дырочную (*p-типа*) проводимость.

В присутствии в кристалле кремния атома висмута, у которого на последнем электронном уровне пять электронов, в узле кристалла, где находится атом висмута, появляется *свободный* электрон, не связанный ковалентной связью с соседними атомами кремния. При передаче кристаллу небольшой энергии этот электрон легко отщепляется от примесного атома и, переходя из валентной зоны в зону проводимости, усиливает *электронную* проводимость кристалла.

Таким образом, атомы Bi являясь донорами, усиливают проводимость *n-типа*.

### Индивидуальные задания

**Задание 1.** Вычислить энергию Ферми  $E_F$  кристалла вашего варианта, приведённого в табл. 8, принимая во внимание следующие положения:

1. Энергия Ферми в металлах вблизи абсолютного нуля связана с концентрацией свободных электронов ( $N$ ) в металле уравнением:

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3N}{8\pi} \right)^{2/3},$$

где  $h$  – постоянная Планка;

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

$m$  – масса электрона, г;

$N$  – концентрация электронов в единице выбранного объёма, м<sup>3</sup>.

2. Концентрация свободных электронов равна концентрации атомов.

3. Концентрацию атомов находят исходя из плотности:  $\rho / M = \nu$  (моль);  
1 моль содержит число частиц, равное постоянной Авогадро.

### Варианты заданий 1

Вариант	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	Вариант	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	Вариант	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>
1. Ag	10490	13. K	8620	25. Zr	6510
2. Al	2700	14. Na	9710	26. Ga	5900
3. Cu	8960	15. Cr	7190	27. In	7310
4. Au	19320	16. Bi	9747	28. Tl	11850
5. Hg	13546	17. Sn	7295	29. Nb	8570
6. Zn	7135	18. Pb	11336	30. Ta	16650
7. Cd	8650	19. V	6110	31. Tc	11487
8. Fe	7874	20. W	19320	32. Re	21030
9. Co	8840	21. Ge	5323	33. Cs	28550
10. Ni	8900	22. Mo	10220	34. Rb	15320
11. Sb	6691	23. Os	22590	35. Li	5340
12. Pt	21450	24. Pd	11970	36. Rh	12450

### Задание 2.

1. Опишите отличия структур кристаллов  $A$  и  $B$  от структуры кристалла  $A_nB_m$ . Какие свойства характерны для этих веществ в кристаллическом состоянии?

2. Охарактеризуйте полупроводниковые свойства кристалла  $A$  и изменение этих свойств, вызванное содержанием указанной примеси.

### Варианты заданий

Задания Варианты	1			2	
	$A$	$B$	$A_nB_m$	$A$	Примесный атом
1	H <sub>2</sub>	C <sub>алм</sub>	CH <sub>4</sub>	C <sub>алм</sub>	Sb, Al
2	Si	F <sub>2</sub>	SiF <sub>4</sub>	Si	Sn, Te
3	Na	F <sub>2</sub>	NaF	Ge	Ca, Bi
4	As	Zn	Zn <sub>3</sub> As <sub>2</sub>	B	Zn, Sb
5	Ba	Cl <sub>2</sub>	BaCl <sub>2</sub>	As	Tl, Pb
6	Mg	Cl <sub>2</sub>	MgCl <sub>2</sub>	Se	Sb, I
7	Ca	F <sub>2</sub>	CaF <sub>2</sub>	Ge	B, P
8	Zn	S	ZnS	Ge	Ga, As
9	Al	N <sub>2</sub>	AlN	Ge	In, Bi
10	As	H <sub>2</sub>	AsH <sub>3</sub>	Si	Zn, S
11	B	F <sub>2</sub>	BF <sub>3</sub>	Si	Fe, Se
12	Ge	Cl <sub>2</sub>	GeCl <sub>4</sub>	Si	Mn, Te
13	Ga	As	GaAs	B	Ge, S

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

14	In	P	InP	B	Zn, P
15	Al	Sb	AlSb	B	Fe, As
16	Pb	S <sub>8</sub>	PbS	C <sub>алм</sub>	B, P
17	Cu	O <sub>2</sub>	Cu <sub>2</sub> O	In	Zn, Sb
18	Si	C <sub>алм</sub>	SiC	C <sub>алм</sub>	Al, Te
19	P	H <sub>2</sub>	PH <sub>3</sub>	Si	B, P
20	Cd	F <sub>2</sub>	CdF <sub>2</sub>	Si	Ga, As
21	B	Cl <sub>2</sub>	BCl <sub>3</sub>	Si	In, Bi
22	Mg	O <sub>2</sub>	MgO	Si	B, Se
23	Al	Cl <sub>2</sub>	AlCl <sub>3</sub>	Ge	Zn, S
24	Cu	S <sub>8</sub>	CuS	Ge	Mn, Se
25	Be	O <sub>2</sub>	BeO	In	Mn, P
26	K	I <sub>2</sub>	KI	B	Cu, V
27	C <sub>граф</sub>	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	C <sub>алм</sub>	Ga, Bi
28	Fe	C <sub>граф</sub>	Fe <sub>4</sub> C <sub>3</sub>	In	Cu, Ge
29	Mn	S <sub>8</sub>	MnS	Se	In, As
30	B	Zn	Zn <sub>3</sub> B <sub>2</sub>	Se	Ga, I
31	V	N <sub>2</sub>	V <sub>3</sub> N <sub>5</sub>	In	Cd, W
32	Sb	S <sub>8</sub>	Sb <sub>2</sub> S <sub>5</sub>	C <sub>алм</sub>	Y, Mo

## Итоговое занятие

### Вопросы к итоговому занятию

1. Краткий обзор атомно-молекулярного учения и его роли в химии.
2. Изучение строения вещества на разных уровнях организации.
3. Электростатическая природа химической связи.
4. Основные типы химической связи: ковалентная и ионная. Длина, энергия и направленность связи. Валентный угол.
5. Полярность связи молекулы.
6. Свойства связанных атомов: электроотрицательность, эффективный заряд, координационное число.
7. Стехиометрия молекул. Квантово-химические методы трактовки ковалентной связи. Принцип локализованных пар и максимального перекрытия.
8. Семиполярная связь и донорно-акцепторное взаимодействие.
9. Метод молекулярных орбиталей. Физическая сущность метода: делокализация электронной плотности между всеми ядрами молекулы. Одноэлектронное приближение.
10. Распределение электронной плотности. Связывающие и разрыхляющие. Гомонуклеарные двухатомные молекулы и молекулярные ионы.
11. Образование МО. Молекулярные орбитали как линейная комбинация s- и p- и d- атомных орбиталей.
12. Трехатомные линейные молекулы и молекулярные ионы в методе МО.
13. Несвязывающие МО. Молекулы без π-связей (BeH<sub>2</sub>) и с π-связями (CO<sub>2</sub>).
14. Угловые трехатомные молекулы (H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>S).
15. Метод МО в приближении Хюккеля (МОХ). Молекулярные π-системы. Заряд, порядок связи, индекс свободной валентности.
16. Расположение уровней энергии и симметрия молекулярных орбиталей.
17. Циклические π-системы, энергии и вид МО. Учет гетероатомов в методе МО. Индуктивные и мезомерные заместители.

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

18. Многоатомные молекулы.
19. Координационные соединения.
20. Элементы теории кристаллического поля. Электронодефицитные молекулы.
21. Теория образование связи в молекуле водорода.
22. Метод наложения валентных схем (метод резонанса). Теория направленных валентностей. Гибридизация АО.
23. Типы гибридизации и стереохимия молекул с ординарными связями. Влияние неподеленных электронных пар центрального атома на валентные углы.
24. Стереохимия молекул с кратными связями.

## 7 ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ, ПРАКТИКУМЫ

Данный вид работы не предусмотрен УП.

## 8 ТЕМАТИКА КУРСОВЫХ, КОНТРОЛЬНЫХ РАБОТ, РЕФЕРАТОВ

Данный вид работы не предусмотрен УП

## 9 ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ К ЗАЧЕТУ

1. Химическое вещество. Классическая теория химического строения
2. Топологическая и геометрическая модели молекулы. Симметрия молекулы
3. Электронная теория химического строения. Поляризация химической связи. Электронная модель молекулы
4. Геометрическая структура молекул в электронной теории химического строения. Модель ОЭПВО.
5. Реакционная способность молекул в электронной теории химического строения
6. Механическая модель молекулы. Вращение и колебания молекул. Симметрия колебаний
7. Типы химических связей. Тетраэдр Грима
8. Метод потенциалов взаимодействия
9. Связь Ван-дер-Ваальса. Природа сил связи. Потенциал Ленарда-Джонса. Определение констант.
10. Ионный тип связи. Постоянная Маделунга. Расчет энергии решетки и определение параметров потенциала взаимодействия ионов в кристалле
11. Металлический тип связи. Модель свободных электронов. Модель множественного перекрытия электронных облаков
12. Промежуточные типы связи. Ионно-металлический и ковалентно-металлический типы химической связи
13. Ионно-ковалентный тип связи. Модель поляризации ионных решеток. Модель смещения общей электронной пары. Модель координационных полимерных структур
14. Ковалентная связь. Свойства ковалентной связи. Электроотрицательность как мера полярности связи
15. Водородная связь
16. Особенности квантовомеханического описания химической связи
17. Многоэлектронная задача. Приближение Борна-Опенгеймера. Приближение самосогласованного поля. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана
18. Метод молекулярных орбиталей
19. Канонические и локализованные молекулярные орбитали

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

20. Концепция гипервалентных связей
21. Электронная корреляция
22. Корреляционные диаграммы в методе МО
23. Метод валентных схем
24. Теория гибридизации
25. Теория резонанса
26. Химическая связь в комплексных соединениях
27. Теория кристаллического поля
28. Теория поля лигандов
29. Фуллерены. Углеродные нанотрубки. Кластеры металлов
30. Структурно-нежесткие молекулы
31. Строение жидкостей и растворов
32. Нанокристаллическое состояние вещества
33. Кристаллическое состояние вещества
34. Зонная теория твердых тел
35. Квазичастицы в твердом теле. Зонные электроны. Эффективная масса. Дырки. Экситоны. Полярны
36. Возбуждение и релаксация электронной подсистемы твердого тела
37. Локализация электронных возбуждений
38. Химические превращения в твердых телах

### 10 САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ

Содержание, требования, условия и порядок организации самостоятельной работы обучающихся с учетом формы обучения определяется в соответствии с «Положением об организации самостоятельной работы обучающихся», утвержденным Ученым советом УлГУ (протокол № 8/268 от 26.03.19 г.).

Форма обучения: очная.

Название разделов и тем	Вид самостоятельной работы	Объем в часах	Форма контроля
Тема 2. Механическая модель молекулы. Метод потенциалов: Промежуточные типы химической связи. Ван-дер-Ваальсовая связь. Водородная связь.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	2	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете
Тема 3. Особенности квантовомеханического описания химической связи: Классификация химических связей с точки зрения характера электронных взаимодействий: двухэлектронные двухцентровые (локализованные) и многоцентровые (делокализованные) связи. Координационная связь.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	4	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

Тема 4. Химическая связь в комплексных соединениях: Расщепление d-уровней центрального иона. Количественная оценка расщеплений. Правило стереохимического ряда.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	4	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете
Тема 5. Теоретическая оценка реакционной способности вещества: Модель переходного состояния реакции. Энергии локализации атома (нуклеофильная, электрофильная, радикальная). Возможности и ограничения статического и динамического методов	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	2	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете
Тема 6. Основные результаты изучения строения молекул: Ротаксаны и катенаны. Фуллерены. Полимеры и биополимеры. Белки.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	4	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете
Тема 7. Строение конденсированных фаз: Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	2	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете
Тема 8. Строение жидкостей и растворов: Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Жидкокристаллическое состояние в биологических системах.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	2	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете
Тема 9. Кристаллическое состояние вещества: Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов.	Проработка учебного материала с использованием ресурсов учебно-методического и информационного обеспечения дисциплины. Подготовка к устному опросу. Подготовка к сдаче зачета.	2	выборочная проверка во время аудиторных занятий; включение вопросов на итоговом занятии, на зачете

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

## 11 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Основная :

1. Винидиктова, Ю. А. Строение и реакционная способность веществ : учебное пособие / Ю. А. Винидиктова, И. В. Исакова. — Кемерово : КузГТУ имени Т.Ф. Горбачева, 2020. — 75 с. — ISBN 978-5-00137-193-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/163563>
2. Михайленко, Ю. А. Строение и реакционная способность веществ : учебное пособие / Ю. А. Михайленко, К. В. Мезенцев. — Кемерово : КузГТУ имени Т.Ф. Горбачева, 2012. — 83 с. — ISBN 978-5-89070-849-6. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/6643>
3. Суворов, А. В. Общая и неорганическая химия в 2 т. Том 1 : учебник для вузов / А. В. Суворов, А. Б. Никольский. — 6-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2021. — 343 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-09094-9. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/470737>

### Дополнительная

1. 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>
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2021. — 183 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00127-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/471665> .
3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2021. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/471666>

### учебно-методическая

1. Шроль О. Ю. Строение вещества: учебно-методическое пособие для выполнения лабораторных работ и самостоятельной работы студентов 3 курса экологического факультета направления подготовки бакалавриата 04.03.01 – Химия / О. Ю. Шроль; УлГУ, Экол. фак. - Ульяновск : УлГУ, 2019. - Загл. с экрана; Неопубликованный ресурс. - Электрон. текстовые дан. (1 файл : 1,38 МБ). - Текст: электронный. <http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Download/MObject/7985>

Согласовано:

Начальник отдела НБ УлГУ / Окунева И.А. /  16.05.2022  
 Должность сотрудника научной библиотеки                      ФИО                      подпись

б) программное обеспечение

1. Microsoft Office
2. ОС Windows Professional
3. Антиплагиат ВУЗ

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

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

### **1. Электронно-библиотечные системы:**

1.1. Цифровой образовательный ресурс IPRsmart : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа». - Саратов, [2022]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.2. Образовательная платформа ЮРАЙТ : образовательный ресурс, электронная библиотека : сайт / ООО Электронное издательство ЮРАЙТ. – Москва, [2022]. - URL: <https://urait.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.3. База данных «Электронная библиотека технического ВУЗа (ЭБС «Консультант студента») : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Политехресурс. – Москва, [2022]. – URL: <https://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4x>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.4. Консультант врача. Электронная медицинская библиотека : база данных : сайт / ООО Высшая школа организации и управления здравоохранением-Комплексный медицинский консалтинг. – Москва, [2022]. – URL: <https://www.rosmedlib.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.5. Большая медицинская библиотека : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Букап. – Томск, [2022]. – URL: <https://www.books-up.ru/ru/library/>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.6. ЭБС Лань : электронно-библиотечная система : сайт / ООО ЭБС Лань. – Санкт-Петербург, [2022]. – URL: <https://e.lanbook.com>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

1.7. ЭБС Znanium.com : электронно-библиотечная система : сайт / ООО Знаниум. - Москва, [2022]. - URL: <http://znanium.com>. – Режим доступа : для зарегистрир. пользователей. - Текст : электронный.

1.8. Clinical Collection : научно-информационная база данных EBSCO // EBSCOhost : [портал]. – URL: <http://web.b.ebscohost.com/ehost/search/advanced?vid=1&sid=9f57a3e1-1191-414b-8763-e97828f9f7e1%40sessionmgr102>. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный.

1.9. База данных «Русский как иностранный» : электронно-образовательный ресурс для иностранных студентов : сайт / ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа». – Саратов, [2022]. – URL: <https://ros-edu.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.

**2. КонсультантПлюс** [Электронный ресурс]: справочная правовая система. /ООО «Консультант Плюс» - Электрон. дан. - Москва : КонсультантПлюс, [2022].

### **3. Базы данных периодических изданий:**

3.1. База данных периодических изданий EastView : электронные журналы / ООО ИВИС. - Москва, [2022]. – URL: <https://dlib.eastview.com/browse/udb/12>. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный.

3.2. eLIBRARY.RU: научная электронная библиотека : сайт / ООО Научная Электронная Библиотека. – Москва, [2022]. – URL: <http://elibrary.ru>. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный

3.3. Электронная библиотека «Издательского дома «Гребенников» (Grebinnikon) : электронная библиотека / ООО ИД Гребенников. – Москва, [2022]. – URL: <https://id2.action-media.ru/Personal/Products>. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Текст : электронный.

**4. Федеральная государственная информационная система «Национальная электронная библиотека»** : электронная библиотека : сайт / ФГБУ РГБ. – Москва, [2022].

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

– URL: <https://нэб.рф>. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

5. [SMART Imagebase : научно-информационная база данных EBSCO](https://ebsco.smartimagebase.com/?TOKEN=EBSCO-1a2ff8c55aa76d8229047223a7d6dc9c&custid=s6895741) // EBSCOhost : [портал]. – URL: <https://ebsco.smartimagebase.com/?TOKEN=EBSCO-1a2ff8c55aa76d8229047223a7d6dc9c&custid=s6895741>. – Режим доступа : для авториз. пользователей. – Изображение : электронные.

#### 6. Федеральные информационно-образовательные порталы:

6.1. [Единое окно доступа к образовательным ресурсам](http://window.edu.ru/) : федеральный портал . – URL: <http://window.edu.ru/> . – Текст : электронный.

6.2. [Российское образование](http://www.edu.ru) : федеральный портал / учредитель ФГАУ «ФИЦТО». – URL: <http://www.edu.ru>. – Текст : электронный.

#### 7. Образовательные ресурсы УлГУ:

7.1. Электронная библиотечная система УлГУ: модуль «Электронная библиотека» АБИС Мега-ПРО / ООО «Дата Экспресс». – URL: <http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Web>. – Режим доступа : для пользователей научной библиотеки. – Текст : электронный.

Согласовано:

Зам. начальника УИТиТ / Ключкова А.В. /  16.05.2022 г.  
Должность сотрудника УИТиТ ФИО подпись дата

## 12 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ

Учебная аудитория 212 для проведения лекций, занятий лабораторного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (с набором демонстрационного оборудования для обеспечения тематических иллюстраций в соответствии с рабочей программой дисциплины). Помещение укомплектовано специализированной мебелью на 24 посадочных мест и техническими средствами: экран настенный, доска аудиторная. Рабочее место преподавателя, WI-FI, интернет. Площадь 42,93 кв.м.

Учебная аудитория для самостоятельной работы студентов 230 с доступом к ЭБС. для самостоятельной работы студентов, Wi-Fi с доступом к ЭИОС, ЭБС. Компьютерный класс укомплектованный специализированной мебелью на 32 посадочных мест и техническими средствами обучения (16 персональных компьютеров) с доступом к сети «Интернет», ЭИОС, ЭБС. Площадь 93,51 кв.м.

Читальный зал научной библиотеки (аудитория 237) с зоной для самостоятельной работы, Wi-Fi с доступом к ЭИОС, ЭБС. Аудитория укомплектована специализированной мебелью на 80 посадочных мест и оснащена компьютерной техникой с доступом к сети «Интернет», ЭИОС, ЭБС, экраном и проектором. Площадь 220,39 кв.м.

## 13 СПЕЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

В случае необходимости, обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося) могут предлагаться одни из следующих вариантов восприятия информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей:

для лиц с нарушениями зрения: в печатной форме увеличенным шрифтом; в форме электронного документа; в форме аудиофайла (перевод учебных материалов в аудиоформат); в печатной форме на языке Брайля; индивидуальные консультации с

Министерство науки и высшего образования РФ Ульяновский государственный университет	Форма	
Ф - Рабочая программа дисциплины		

при- влечением тифлосурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации;  
для лиц с нарушениями слуха: в печатной форме; в форме электронного докумен-  
та; видеоматериалы с субтитрами; индивидуальные консультации с привлечением сур-  
допереводчика; индивидуальные задания и консультации;

для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата: в печатной форме; в  
форме электронного документа; в форме аудиофайла; индивидуальные задания и кон-  
сультации.

В случае необходимости использования в учебном процессе частич-  
но/исключительно дистанционных образовательных технологий, организация работы  
ППС с обучающимися с ОВЗ и инвалидами предусматривается в электронной инфор-  
мационно-образовательной среде с учетом их индивидуальных психофизических осо-  
бенностей.

Разработчики: \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ доцент О.Ю. Шроль

16.05.22