ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет
Кафедра физической химии

УТВЕРЖДАЮ:
проректор по научно-методической
и учебной работе
_____ Е.И.Скафа
«22» _____ 2020 г.
МП

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
«Строение вещества»

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	–
Образовательная программа:	бакалавриат
Квалификация:	академический бакалавр
Форма обучения:	очная, очно-заочная, заочная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:
Декан химического факультета
_____ А.В. Белый
« 16 » апреля 2020 г.

Программа учебной дисциплины «Строение вещества» составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования (ГОС ВПО) Донецкой Народной Республики (ДНР) по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 454 от «20» апреля 2016 г.;
Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.;
учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.03.01 Химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
к.х.н., доцент _____ Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии
Протокол №13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой _____ В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета
Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета _____ Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Учебная дисциплина «Строение вещества» относится к вариативной части профессионального блока дисциплин (ПБ.ВС.6) подготовки студентов ОУ Бакалавр по направлению подготовки 04.03.01 Химия. Дисциплина реализуется на химическом факультете ДонНУ кафедрой физической химии. Основывается на базе дисциплин: «Неорганическая химия», , «Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия», «Информатика». Является основой для выполнения дипломной работы бакалавра.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Характеристика учебной дисциплины		
Специальность	04.03.01 Химия	
Специализация		
Образовательная программа	Бакалавриат	
Квалификация	Академический бакалавр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	Вариативная часть профессионального блока	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	МК, зачет	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	2.5	
Год подготовки	4	
Семестр	7	
Количество часов	90	
- лекционных	18	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	18	
- самостоятельной работы	54	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,	5	
в т.ч. аудиторных	2	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели:

- *педагогическая* – формирование у студентов панорамы знаний о атомно-молекулярной архитектуре и электронной структуре химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях, подготовка химиков, которые умеют применять возможности современной структурной химии для решения текущих химических проблем;
- *дидактическая* – усвоение знаний, предусмотренных программой, благодаря целенаправленному сотрудничеству преподавателя и студента;
- *методическая* – выделить главное звено в каждой теме, что будет способствовать формированию основных понятий по курсу, формированию знаний в результате активизации познавательной деятельности студентов, применение различных методов активного обучения.

Задачи:

- раскрыть закономерности атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры молекулярного и супрамолекулярного уровня организации вещества; подготовить спе-

циалиста - химика, который, опираясь на основные концепцияи атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры химических соединений сможет объяснить их свойства.

- выделить методологически важные вопросы химии и на конкретных примерах показать взаимосвязь строения вещества на молекулярном и супрамолекулярном уровнях с его свойствами.
- развитие умений, которые помогут грамотно применять методы современные технологии стуктурной химии при решении различных задач,
- дать в руки будущим специалистам-экспериментаторам инструмент, который позволил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий квантовой химии при решении типичного цикла задач: расчеты геометрических характеристик молекул; построение карт распределения электронной плотности вдоль разных сечений в пространстве молекулы; расчеты дипольных моментов и энергий ионизации молекул; расчеты поверхности потенциальной энергии химических реакций.

Требования к результатам освоения дисциплины: Процесс изучения дисциплины «Строение вещества» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ГОС ВПО ДНР по направлению подготовки 04.03.01 Химия и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.03.01 Химия:

а) общекультурных (ОК):

- способностью использовать основы философских знаний для формирования мировоззренческой позиции (ОК-1);
- способностью к самоорганизации и самообразованию (ОК-7).

б) общепрофессиональных (ОПК):

- способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
- владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2);
- способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);
- знанием норм техники безопасности и умением реализовать их в лабораторных и технологических условиях (ОПК-6).

в) профессиональных (ПК):

научно-исследовательская деятельность

- способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам (ПК-1);
- владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований (ПК-2);
- владением системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);
- способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов (ПК-4);
- способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологии (ПК-5);
- владением навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций (ПК-6);
- владением методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств (ПК-7).

производственно-технологическая деятельность

– способностью использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач (ПК-8).

организационно-управленческая деятельность:
способностью принимать решения в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий (ПК-12).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен
знать:

– основные положения классической и квантовой теории строения вещества;
– основные понятия атомно-молекулярной архитектуры химических соединений**.**
– ключевые концепции структурной химии;
– закономерности связи электронного строения химических соединений с их свойствами и реакционной способностью.

уметь:

– получать структурно-химическую информацию молекулярных объектов методами молекулярного моделирования:
– определить равновесную структуру;
– провести конформационный анализ;
– рассчитать энергию ионизации в вертикальном и адиабатическом приближении, а также по теореме Купманса;
– рассчитать энергию диссоциации химических соединений на ионы или радикалы;
– рассчитать дипольные моменты и использовать их для обоснования результатов конформационного анализа;
– анализировать полученные результаты, опираясь на знания концепций структурной химии;
– использовать программы структурной химии для решения химических задач;
– осуществить поиск необходимых физико-химических данных в электронных источниках научной химической информации;
– применять свои знания на практике и владеть навыками работы на современных компьютерных системах;
– творчески подходить к решению задачи;
– проводить поиск структурной информации в современных электронных ресурсах;
– провести и обосновать выбор метода структурной химии, который необходим для решения поставленной задачи;
– ориентироваться в круге основных проблем современной структурной химии.

владеть:

– методами исследования структурной химии для решения конкретных химических задач;
– навыками применения основных положений квантовой химии для анализа свойств химических соединений;
– навыками применения основных положений структурной химии для анализа свойств химических соединений;
– методологией квантово-химического опредедения прочности химической связи;
– методологией квантово-химического опредедения параметров электронодонорных и электроноакцепторных свойств химических соединений;
– методологией квантово-химического опредедения дипольных моментов химических соединений;
– методологией квантово-химического опредедения энергии электронных переходов из основного в возбужденное эдектронное состояеие химических соединений;
– методологией квантово-химического прогноза направления протекания химической реакции;

- методогией анализа результатов молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- методологией расчета квантоыо-химических индексов реакционной способности химических частиц вещества;
- метолологией кваитово-химической оценки кинетических и активационных параметров химической реакций.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
Содержательный модуль 1	
Тема 1. Молекулярная структура вещества	Молекулярная структура химических частиц вещества.Топологическая и геометрисеская модель молекулярной структуры вещества. Статическая и динамическая модель молекулярной структуры вещества. L, T, I - модель молекулярной структуры конденсированной фазы вещества. Влияние агрегатного состояния на молекулярную структуру химических частиц вещества. Стереохимическое описание молекулярной структуры. Параметры молекулярной структуры, внутренние координаты химических частиц вещества..
Тема 2. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества методом ретгеноструктурного анализа. r – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. r' – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. r, U – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. r,ρ – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества методом электронографии. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества методом нейтронографии. Эффекты влияния кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества понижение молекулярной симмерии: конформационная неэквивалентность молекул. конформационний полиморфизм молекул. Операционные эффекты дифракционных методов определения молекулярной структуры.
Тема 3. Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	Спектроскопия и спектростуктурная информация. Энергия фотона. Образование и дезактивация электронно-возбужденного состояния химических частиц (диаграмма Яблонского). Спиновая мультиплетность химических частниц в основном, возбужденном и триплетном электронном состоянии. Спиновая мультиплетность ионов. Спиновая мультиплетность химических частниц вещества с непарным числом электронов: радикалов, катионов и анионов. Энергия перехода из

	основного в возбужденное электронное (колебательное и вращательное) состояние. Диаграмма Яблонского. Внутренняя конверсия. Интеркомбинационная конверсия. Фосфоресценция. Флюоресценция. Молекулярная и спиновая спектроскопия. Необходимое условие появления полосы в спектре химической частицы. Достаточное условие появления полосы в спектре химической частицы. Следствия действия радиоволнового, микроволнового, инфракрасного, ультрафиолетового, рентгеновского электромагнитного излучения на молекулярную структуру. Информационно-поисковые спектроструктурные системы. Экспертные спектроструктурные системы. Безэталонный спектроструктурный анализ. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
Тема 4. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	Поверхность потенциальной энергии и равновесная молекулярная структура химических частиц вещества. Условия и процелура определения равновесного состояния химических чпстиц вещества. Алгоритмы оптимизации молекулярной структуры химических частиц вещества. Теорема вириала для равновесного состояния химических частиц. Получить аналитическое выражение теоремы вириала для равновесного состочяния химических соединений. Соотношение кинетитеской и полной энергии в равновесном состоянии химических соединений. Ссоотношение потенциальной и полной энергии в равновесном состоянии химических соединений. Методология установления равновесной структуры молекул
Тема 5. Методология конформационного анализа химических соединений.	Понятие конформационного анализа химических соединений. Определение числа конформеров на ППЭ. Энергетические барьеры конформационных переходов. Скорость конформационных переходов. Описание состава равновесной смеси конформеров. Определение состава смеси конформеров методами молекулярной спектроскопии. Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов. Определение состава смеси конформеров методом теоретического конформационного анализа.
Тема 6. Структурная поляризация химических соединений	Представление о природе постоянного электрического дипольного момента химических частиц вещества. Индуцированная молекулярная поляризация. Представление о природе индуцированного дипольного момента химических частиц вещества. Представление о природе мгновенного дипольного момента химических частиц вещества. Поляризуемость химических частиц вещества. Надполяризуемость химических частиц вещества. Молярная поляризация вещества. Уравнение Клаузиуса - Моссоти. Электронная поляризация вещества. Уравнение Лорентца - Лоренца. Атомная поляризация вещества. Ориентационная поляризация вещества. Уравнение Дебая. Определение дипольных мо-

	ментов химических частиц вещества методом Дебая. Определение точечного (зарядового) и гибридного (орбитального) дипольного момента химических частиц вещества методами квантовой химии.
Тема 7. Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	Потенциалы ионизации химических частиц вещества. Сродство к электрону химических частиц вещества. Вертикальная ионизация химических частиц. Адиабатическая ионизация химических частиц. Вертикальный потенциал ионизации. Вертикальное сродство к электрону. Принцип Франко-Кондона. Адиабатический потенциал ионизации. Адиабатическое сродство к электрону. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии. Определение энергии ионизации химических частиц в приближении замороженных орбиталей. Определение потенциалов ионизации химических частиц в приближении замороженных орбиталей. Определение сродства к электрону химических частиц в приближении замороженных орбиталей. Определение энергии вертикальной ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение вертикальных потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение вертикального сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии. Определение энергии адиабатической ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение адиабатических потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии. Определение адиабатического сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии.
Тема 8. Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи. Концепция валентности в теории химической связи. Электронно-ионная концепция теории химической связи. Классическая электроннаяконцепция в теории химической связи. Орбитально-зарядовая концепция в теории химической связи. Принцип орбитального соответствия в теории химической связи. Связывающие и антисвязывающие комбинации s – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие σ-комбинации p – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие π-комбинации p – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие комбинации s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В. Энергия двухатомных взаимодействий (E_{AB}) в приближении Малликена. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий. Энергия йонных двухатомных взаимодействий. Энергия диссоциации химических соединений. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействий в молекулах. Теорема Гельмана-Фейнмана. Электростатическая теорема

	Гельмана – Фейнмана. Теорема вириала и химическая связь
Тема 9. Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества. Природа Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий химических частиц вещества. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Водородная связь. Ассоциаты янус-молекул Энергия Н – связи. Профили ППЭ Н – ассоциатов. Длина Н – связи. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов. Изменение длины связи ~X—H… в Н-ассоциатах. Конфигурация фрагмента ~ X – H…Y~ в Н-ассоциатах. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах. ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов. Дипольный момент Н-ассоциатов. Ион-ионные взаимодействия. Ион-дипольные взаимодействия. Катион-π-взаимодействия. π -π-Стэкинг- взаимодействия. Гидрофобные взаимодействия.

Тематический план

	Содержательный модуль 1											
Названия содержательных модулей и тем	**Количество часов**											
	Очная форма обучения						**Заочная форма обучения**					
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. Молекулярная структура вещества	10	2		2	6							
Тема 2. Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	10	2		2	6							
Тема 3. Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	10	2		2	6							

Тема 4. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	10	2		2	6							
Тема 5. Методология конформационного анализа химических соединений.	10	2		2	**6**							
Тема 6. Структурная поляризация химических соединений	10	2		2	**6**							
Тема 7. Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	10	2		2	**6**							
Тема 8. Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	10	2		2	**6**							
Тема 9. Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	10	2		2	**6**							
Итого по содержательному модулю 1	**90**	**18**		**18**	**54**							

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Темы лекционных занятий

№ п/п	***Название темы***	***Количество часов***
1	Молекулярная структура вещества	2
2	Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	2
3	Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	2
4	Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	2
5	Методология конформационного анализа химических соединений.	2
6	Структурная поляризация химических соединений	2
7	Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	2
8	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	2
9	Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	2
	ВСЕГО	**18**

Темы лабораторных занятий

№ п/п	Название темы	*Количество часов*
1.	HyperChem методология определения параметров статической и динамической молекулярной структуры химических соединений	2
2.	Методология квантовохимического расчета при заданной температуре	2
3.	Методология расчета QSAR параметров химических соединений	2
4.	Методология квантовохимического расчета в режиме координат внутреннего обращения	2
5.	Методология конформационного анализа химических соединений	2
6.	Методология определения энергии ионизации химических соединений	2
7.	Методология определения энергии диссоциации химических соединений	2
8.	Методика конструирования супрамолекулярных наноасоциатов	2
9.	Молекулярное моделирование супрамолекулярных наночастиц	2
	ВСЕГО	**18**

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Организация самостоятельной работы студентов

№ п/п	*Название темы*	*Количество часов*
1	Молекулярная структура вещества	6
2	Методологические аспекты установления молекулярной структуры вещества дифракционными методами структурной химии	6
3	Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии.	6
4	Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.	6
5	Методология конформационного анализа химических соединений.	6
6	Структурная поляризация химических соединений	6
7	Электронодонорные и электроноакцепторные свойства химических частиц вещества	6
8	Взаимодействия в молекулах. Химическая связь.	6
9	Невалентные взаимодействия химических частиц вещества	6
	ВСЕГО	**54**

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

(*не предусмотрены программой*)

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

.

1. Топологическая и геометрисеская; статическая и динамическая; L,T,I и континуальная модель молекулярной структуры вещества.
2. Стереохимическое описание молекулярной структуры.
3. Методология установления молекулярной структуры вещества методом ретгеноструктурного анализа.
4. Методология установления молекулярной структуры вещества методом электронографии.
5. Методология установления молекулярной структуры вещества методом нейтронографии.
6. Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.
7. Влиянме агрегатного состояния вещества на его молекулярную структуру.
8. Методология конформационного анализа химических соединений.
9. Поверхность потенциальной энергии, конформации и конформеры химических частиц вещества, число конформеров в конформационной смеси, барьеры внутреннего вращения.
10. Методология определения состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии
11. Методология определения состава смеси конформеров методами спектроструктурной химии.
12. Спектроструктурные информационно-поисковые системы структурной химии.
13. Методология установления молекулярной структуры химических частиц вещества с использованием спектроструктурных экспертных систем структурной химии.
14. Спектроструктурный безэталонный анализ структурной химии.
15. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
16. Параметры электронодонорных и электроноакцепторных свойства химических частиц вещества.
17. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопи.
18. Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц.
19. Принцип Франка - Кондона.
20. Постоянный электрический дипольный момент химических частиц вещества.
21. Индуцированная молекулярная поляризация и индуцированный дипольный момент химических частиц вещества.
22. Мгновенная молекулярная поляризация и мгновенный дипольный момент
23. Концепция орбитально-электростатических взаимодействий в теории химической связи.
24. Энергия диссоциации химических соединений.
25. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействий в молекулах.
26. Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.
27. Объяснить действие теоремы вириала в процессе образования химической связи.
28. Процесс внутренней электронной конверсии.
29. Процесс интеркомбинационной электронной конверсии.
30. Процесс флуоресценции.
31. Процесс фосфоресценции.
32. Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия и их прочность.
33. Н - взаимодействия химических частиц вещества.

9. ОБРАЗЕЦ МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

Направление подготовки:	***04.03.01 Химия***
Программа подготовки:	***бакалавриат***
Семестр	***7***
Учебная дисциплина	***Строение вещества***

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА
ВАРИАНТ №1

1. Аргументировать методологию определения адиабатического потенциала ионизации молекулы $(CH_3)_3N$. Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.
2. Описать методологию определения орбитального сродства к электрону в соответсвии теоремы Купманса молекулы $(CH_3)_3N$. Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.
3. Объяснить методологию определения энергии дезактивации триплетного электронного состоянии (T_1) молекулы $(CH_3)_3N$ путем фосфоресценции ($T_1 \rightarrow S_0$). Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.
4. Определить спин и спиновую мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов.
5. Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия и их прочность.

Утверждено на заседании кафедры физической химии,
протокол № ___ от «_____» _____ 20_____ г.

Заведующий кафедрой _____ В.М. Михальчук
Преподаватель _____ Н.А. Туровский

Критерии оценивания модульного контроля

Номер задания	***Количество баллов***
1	10
2	10
3	10
4	10
5	5
Всего	45

10. ОБРАЗЕЦ БИЛЕТА (зачет)

Теоретические вопросы к зачету

1. Молекулярная структура химических частиц вещества.
2. Топологическая и геометрисеская; статическая и динамическая; L,T,I и континуальная модель молекулярной структуры вещества.
3. Стереохимическое описание молекулярной структуры.
4. Метолология установления равновесной структуры химических частиц вещества методами компьютерной структурной химии.
5. Дифракционные методы определения молекулярнойструктуры вещества.
6. Методология установления молекулярной структуры вещества методом ретгеноструктурного анализа.
7. r – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
8. r' – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
9. r, U – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
10. r,ρ – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
11. Методология установления молекулярной структуры вещества методом электронографии.
12. Методология установления молекулярной структуры вещества методом нейтронографии.
13. Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.
14. Влиянме агрегатного состояния вещества на его молекулярную структуру.
15. Методология конформационного анализа химических соединений.
16. Поверхность потенциальной энергии, конформации и конформеры химических частиц вещества, число конформеров в конформационной смеси, барьеры внутреннего вращения.
17. Уравнения определения состава равновесной смеси двух конформеров.
18. Уравнения определения состава равновесной смеси трех конформеров.
19. Методология определения состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии
20. Методология определения состава смеси конформеров методами спектроструктурной химии.
21. Методология определения состава смеси конформеров методом дипольных моментов.
22. Конформационная номенклатура.
23. Спектроскопия и спектроструктурная инфориация.
24. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с радиоволновым электромагнитным излучением.
25. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с микроволновым электромагнитным излучением.
26. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с инфракрасным электромагнитным излучением.
27. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с ультрафиолетовым электромагнитным излучением.
28. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с с рентгеновским электромагнитным излучением.
29. Необходимиое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц.
30. Спектроструктурные информационно-поисковые системы структурной химии.
31. Методология установления молекулярной структуры химических частиц вещества с использованием спектроструктурных экспертных систем структурной химии.

32. Спектроструктурный безэталонный анализ структурной химии.
33. Методология установления структуры молекул методами спектроскопии.
34. Параметры электронодонорных и электроноакцепторных свойства химических частиц вещества.
35. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопи.
36. Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц.
37. Принцип Франка - Кондона.
38. Методология определения потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии.
39. Методология определения адиабатического потенциала ионизации химических частиц метолами квантовой химии..
40. Структурные изменения химической частицы в процессе адиабатической ионизации.
41. Методология определения вертикального потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии.
42. Структурные изменения химической частицы в процессе вертикальной ионизации.
43. Методология определения орбитального потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии..
44. Структурные изменения химической частицы при олрнделении потенциала ионизации в соответствии с теоремой Купманса.
45. Определение энергии сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии
46. Определение энергии адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
47. Определение энергии вертикального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
48. Определение энергии орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
49. Атомно-молекулярная поляризация химических частиц вещества.
50. Постоянный электрический дипольный момент химических частиц вещества.
51. Индуцированная молекулярная поляризация и индуцированный дипольный момент химических частиц вещества.
52. Мгновенная молекулярная поляризация и мгновенный дипольный момент химических частиц вещества.
53. Поляризуемость химических частиц вещества.
54. Сверхполяризуемость химических частиц вещества.
55. Молекулярная и молярная поляризация вещества. Уравнение Клаузиуса -Моссоти.
56. Молекулярная и молярная электронная поляризация вещества. Уравнение Лорентца - Лоренца.
57. Молекулярная и молярная атомная поляризация вещества.
58. Молекулярная и молярная ориентационная поляризация вещества. Уравнение Дебая.
59. Методология экспериментального определения дипольных моментов химических частиц вещества.
60. Методология квантово-химического расчета дипольных моментов.
61. Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов
62. Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи.
63. Концепция валентности в теории химической связи.
64. Концепция злектронно-ионной теории химической связи (Коссель).
65. Концепция электронных пар в теории химической связи (Льюис).
66. Концепция орбитально-электростатических взаимодействий в теории химической связи.
67. Принцип соответствия атомных орбиталей в процессе образования химической связи,

68. Графически представить взаимодействие s – АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образование химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_S + c_{i\mu}\varphi_S +_{...}$$

69. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_S - c_{i\mu}\varphi_S +_{..}$$

70. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_S + c_{i\mu}\varphi_S +_{....}$$

71. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_S - c_{i\mu}\varphi_S +_{....}$$

72. Графически представить σ– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_{Py} - c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

73. Графически представить σ– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

74. $\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_{Py} - c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$

75. Графически представить σ– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

76. Графически представить σ– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

77. Графически представить π– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_{Py} - c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

78. Графически представить π– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

79. Графически представить π– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_{Py} + c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

80. Графически представить π– взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_{Py} - c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

81. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_s - c_{i\mu}\varphi_{Py_} +_{....}$$

82. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_S + c_{i\mu}\varphi_{Py_}+....$$

83. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_S+ c_{i\mu}\varphi_{Pz_}+....$$

84. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...- c_{i\nu}\varphi_S - c_{i\mu}\varphi_{Pz_}+....$$

85. Энергия двухатомных взаимодействий (E_{AB}) в приближении Малликена.
86. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий.
87. Энергия ионных двухатомных взаимодействий.
88. Энергия диссоциации химических соединений.
89. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействий в молекулах.
90. Теорема Гельмана-Фейнмана.
91. Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.
92. Сформулировать теорему вририала.
93. Получть выражение теоремы вириала для не равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.
94. Получить выражение теоремы вириала для равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.
95. Используя теорему вирива получить выражение V = 2E.
96. Используя теорему вирива получить выражение T= –E.
97. Используя теорему вирива получить выражение V = –2T.
98. Объяснить действие теоремы вириала в процессе образования химической связи.
99. Основное синглетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
100. Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
101. Триплетное электронное состояние химических частиц вещества, его спин и спиновая мультиплетность.
102. Возбужденное электронное состояние атмосферного молекулярного кислорода, его спин и спиновая мультиплетность.
103. Основное электронное состояние атмосферного молекулярного кислорода, его спин и спиновая мультиплетность.
104. Основное электронное состояние химических частиц вещества
105. Образование и дезактивация электронно-возбужденного синглетного состояния химических частиц: диаграмма Яблонского.
106. Процесс внутренней электронной конверсии.
107. Процесс интеркомбинационной электронной конверсии.
108. Процесс флуоресценции.
109. Процесс фосфоресценции.
110. Спин и спиновая мультиплетность катионов химических частиц.
111. Спин и спиновая мультиплетность анионов химических частиц.
112. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: катионов-радикалов.
113. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: радикалов.

114. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов: анион-радикалов.
115. Внутри- и межмолекулярные невалентные взаимодействия и их прочность.
116. Ван-дер-Ваальсовы интра- и интермолекулярные взаимодействия.
117. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
118. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
119. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
120. Н - взаимодействия реактантов.
121. Ассоциаты янус-молекул
122. Энергия Н - связи
123. Профили ППЭ Н – ассоциатов
124. Длина Н – связи.
125. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов.
126. Изменение длины связи ~X—H… в Н-ассоциатах
127. Конфигурация фрагмента ~ X – H…Y~ в Н-ассоциатах.
128. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах.
129. ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов.
130. Дипольный момент Н-ассоциатов.

Образец билета (зачет)

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

Направление подготовки:	***04.03.01 Химия***
Программа подготовки:	***бакалавриат***
Семестр	***7***
Учебная дисциплина	***Строение вещества***
а	

БИЛЕТ № 1 (зачет)

1. Графически представить взаимодействие АО, которые центрированы на разных атомах и определить связывающий или антисвязывающий вклад этого взаимодействия в образпвание химической связи.

$$\psi_i = ...+ c_{i\nu}\varphi_S + c_{i\mu}\varphi_{Py_}+.$$

2. Получить выражение теоремы вириала для равновесного состояния двухатомного молекулярного фрагмента.
3. Аргументировать процесс флуоресценции.
4. Методология определения вертикального потенциала ионизации химических частиц методами квантовой химии.
5. Структурные изменения химической частицы в процессе вертикальной ионизации.

Утверждено на заседании кафедры физической химии
Протокол № от « » 20___ г.

Заведующий кафедрой _____ проф. Михальчук В.М.

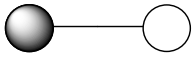
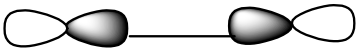
Преподаватедь _____ доц. Туровский Н.А.

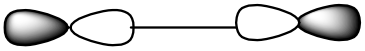
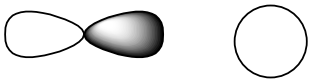
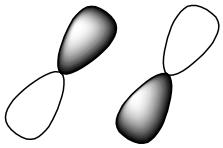
Критерии оценивания экзамена

Номер задания	***Количество баллов***
1	10
2	10
3	10
4	10
5	10
Всего	**50 баллов**

11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенных тестах укажите правильный ответ (правильных вариантов ответа один или несколько).

1.	Проанализировать структуру МО (ψ_2) $\psi_2 = \ldots - c_{21}\varphi_{Sx(A)} + c_{22}\varphi_{Px(B)} + \ldots$ и определить тип вклада s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи. а. связываюший вклад; б. антивязываюший вклад; в. несвязываюший вклад.	
2.	S АО ценрированы на атомах А и В и образуют … комбинацию.  Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{S(A)}$ и $c_{22}\varphi_{S(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь: $\Psi_2 = \ldots c_{21}\varphi_{S(A)} \ldots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ а. связываюшую; б. антивязываюшую; в. несвязываюшую. г. $- c_{21}\varphi_{S(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{S(A)}$; е. $- c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. $+ c_{22}\varphi_{S(B)}$.	
3.	p_X АО ценрированы на атомах А и В и образуют … комбинацию  Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{Px(A)}$ и $c_{22}\varphi_{Px(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь: $\Psi_2 = \ldots c_{21}\varphi_{Px(A)} \ldots c_{22}\varphi_{Px(B)} +$ а. связываюшую; б. антивязываюшую; в. несвязываюшую. г. $-c_{21}\varphi_{Px(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{Px(A)}$;	

	е. $-c_{22}\varphi_{Px(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{Px(B)}$.	
4.	p_X АО ценрированы на атомах А и В и образуют … комбинацию  Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{Px(A)}$ и $c_{22}\varphi_{Px(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь: $\Psi_2 = \ldots c_{21}\varphi_{Px(A)} \ldots c_{22}\varphi_{Px(B)} +$ а. связываюшую; б. антивязываюшую; в. несвязываюшую. г. $-c_{21}\varphi_{Px(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{Px(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{Px(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{Px(B)}$.	
5.	p_X и S АО ценрированы на атомах А и В и образуют … комбинацию  Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{Px(A)}$ и $c_{22}\varphi_{S(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь: $\Psi_2 = \ldots c_{21}\varphi_{Px(A)} \ldots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ а. связываюшую; б. антивязываюшую; в. несвязываюшую. г. $-c_{21}\varphi_{Px(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{Px(A)}$; е. $- c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. $+ c_{22}\varphi_{S(B)}$.	
6.	P_Z АО ценрированы на атомах А и В и образуют … π-комбинацию  Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{Pz(A)}$ и $c_{22}\varphi_{Pz(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь: $\Psi_2 = \ldots c_{21}\varphi_{Pz(A)} \ldots c_{22}\varphi_{Pz(B)} +$ а. связываюшую; б. антивязываюшую; в. несвязываюшую. г. $-c_{21}\varphi_{Pz(A)}$; д. $+ c_{21}\varphi_{Pz(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{Pz(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{Pz(B)}$.	

7.	Химическая система будет в состоянии равновесия, если суммарные силы Гельмана – Фейнмана действующие на каждый ее атом будут …: а. максимальные; б. минимальные; в. равны нулю; г. отрицательные.	
8.	Согласно концепции Гельмана – Фейнмана в теории химической связи межъядерное отталкивание … образованию химической связи. а. способствует; б. не способствует.	
9.	Согласно концепции Гельмана – Фейнмана в теории химической связи ядерно-электронные взаимодействия антисвязывающей области … образованию химической связи. а. способствуют; б. не способствуют.	

12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно-учебная работа студента	Текущий контроль	Всего
	Тестирование Письменные работы: практические задания, задания репродуктивного уровня, задания для домашней работы, контрольные работы Задания к лабораторным работам Устное собеседование.	**50 баллов**
max 5 баллов	max 45 баллов	

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Сумма баллов по 100 балльной шкале	По шкале ECTS	По государственной шкале	При оценке экзамена преподаватель руководствуется следующими принципами
90–100	A	«Отлично» (5)	показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы
80–89	B	«Хорошо» (4)	показаны систематические и глубокие знания при ответе на все вопросы билета, понимание физической сущности проблемы, но при ответе допущены некото-

			рые ошибки и неточности
75–79	C		показаны систематические знания при ответе на все вопросы билета, но при ответе допущены некоторые ошибки и неточности
70–74	D	«Удовлетворительно» (3)	показаны несистематические и неглубокие знания при ответе на вопросы билета, при ответе допущено несколько ошибок, исправленных самим студентом
60–69	E		поверхностные знания при ответе на вопросы билета, допущено ряд неточностей, которые студент не в состоянии самостоятельно исправить
35–59	FX	«Неудовлетворительно» с возможностью повторной аттестации (2)	нет ответов на основные вопросы билета, нет ответов на дополнительные и наводящие вопросы
0-34	F	«Неудовлетворительно» (2) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	выполнение менее 30 % обязательных заданий; неумение раскрыть основное содержание задания; неспособность формулировать выводы.

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории оборудованной меловой доской, мультимедийным проектором и экраном. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе: 10 персональных компьютеров. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета.

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№ п/п	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
	Основная литература		
1.	Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В. Г. Цирельсон // М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 496 с.	30	+
2.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	
3.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	Электронный ресурс	

4.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Електронний ресурс]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк : ДонНУ, 2009.	Электронный ресурс	+
5.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Текст]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Текст]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с.	17	+
6.	Опейда, Й.О. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії [Електронний ресурс] / Й.О. Опейда; Ін-т фізико-орган. хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України. – Донецьк: ДонНУ, 2013. / Опейда, И.А. Математическое и компьютерное моделирование в химии [Электронный ресурс] / И.А. Опейда; Ин-т физико-орган. химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАН Украины. – Донецк : ДонНУ, 2013.	Электронный ресурс	+
Дополнительная литература			
7.	Semiempirical and DFT Modeling of the IR Spectra of Benzoyl Peroxide Derivatives / N.A. Turovskij et al. // On the borders of physics, chemistry, biology, medicine and agriculture. Re-search and development / ed. O.V. Stoyanov, E. Ktodzińska, G.E. Zaikov; Inst. for Engineering of Polymer Materials and Dyes. – Toruń, 2014. – Vol. II. – P. 131-143. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4321	Электронный ресурс	+
8.	Ракша, О.В. Інформатика, інформаційні технології [Електронний ресурс]:: для студ. хім. спец. / О.В. Ракша, О.М. Пастернак, М.А. Туровський; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2011. – 118 с. Ракша, Е.В. Информатика, информационные технологии [Электронный ресурс]:: для студ. хим. спец. / Е.В. Ракша, Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский; Донецкий нац. ун-т. – Донецк: ДонНУ, 2011. – 118 с.	Электронный ресурс	+

15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. **http://mondnrюru/** – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики
2. **http://resobrnadzor.ru/** – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

(*при наличии.* ***Обязательное наличие лицензии*** *или личные авторские разработки*)

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46484614);

2. Microsoft Office ((корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46472919);
3. MOPAC 2016 – комплекс программ структурной химии (программа доступа бесплатно для академического, некоммерческого использования. Академическая лицензия).
4. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
5. Лицензия GPL, Apach, BSD для свободного программного обеспечения:
   – Антивирус Касперского;
   – Adobe Acrobat Reader.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на _____год.
Протокол № от « » _____ г.

Заведующий кафедрой _____ В.М. Михальчук