

Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Донецкий государственный университет»

Химический факультет  
Кафедра физической химии



УТВЕРЖДАЮ

проректор

П.А. Машаров

«29» марта 2024 г.

МП

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА»**

Укрупненная группа направлений подготовки	04.00.00 Химия
Программа высшего образования	Программа специалитета
Специальность	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Квалификация	Химик. Преподаватель химии
Форма обучения	Очная

Рабочая программа адаптирована для лиц  
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

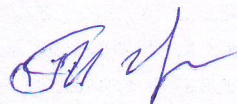
Донецк 2024



Рабочая программа дисциплины «**Строение вещества**» для обучающихся по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 652 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2024 года.

Разработчик:

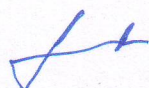
Доцент кафедры физической химии,  
канд. хим. наук, доцент



Н.А. Туровский

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры физической химии  
Протокол от 26.03.2024 г. № 14

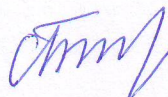
Заведующий кафедрой



В.М. Михальчук

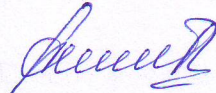
СОГЛАСОВАНО:

Декан химического факультета  
28.03.2024 г.



С.Г. Бахтин

Учебно-методическая комиссия химического факультета  
Протокол от 27.03.2024 г. № 2  
Председатель



Р.И. Лыга

Руководитель основной профессиональной образовательной программы,  
канд. хим. наук, доц.  
28.03.2024 г.



О.В. Баранова



## 1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы специалитета: «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия», «Информатика», «Математика», «Физика» Знания и умения, полученные в ходе изучения дисциплины «Строение вещества», являются основой для изучения, сопутствующих и последующих дисциплин, «Высокомолекулярные соединения», «Химия коллоидных и наносистем», «Супрамолекулярная химия», «Компьютерная структурная химия»,

1.2. Дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

ознакомительная практика, педагогическая практика, научно-исследовательская работа, преддипломная практика.

## 2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (Программа специалитета)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ОД Строение вещества
Часть образовательной программы	Вариативная часть. (Безальтернативные дисциплины)
Количество зачетных единиц / всего часов	4.5/162

### 2.2. Распределение часов по периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы+контроль	всего	
Очная	5	9	26	26	-	110	162	Экзамен

## 3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Формирование у обучающихся методологической и научной культуры, 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

4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ  
ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ  
ИНДИКАТОРЫ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	<b>ОПК-3.1.</b> Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.	<b>Знает</b> теоретические и полуэмпирические модели, необходимые для решения задач <b>Умеет</b> использовать стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности химической направленности

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Не зная структуры молекулы, нельзя понять ее поведение.	
<b>Концептуальные основы структурной химии</b>	Атомно-молекулярная архитектура и молекулярная структура вещества. Топологическая и геометрическая 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.
<b>Электронное состояние химических частиц вещества</b>	Основное и возбужденное электронное состояние химических частиц вещества. Синглетное электронное состояние химических частиц вещества. Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества. Триплетное электронное состояние химических частиц вещества. Образование и дезактивация электроно-возбужденного состояния химических частиц вещества. Внутренняя электронная конверсия – тип электронного перехода. Интеркомбинационная электронная конверсия – тип электронного перехода. Флуоресценция – тип электронного перехода. Фосфоресценция – тип электронного перехода. Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в триплетном электронном состоянии. Спиновая

	<p>мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в возбужденном синглетном электронном состоянии. Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в триплетном электронном состоянии. Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов. <b>Задание для самостоятельной работы.</b> Спин и спиновая мультиплетность катионов химических частиц. Спин и спиновая мультиплетность анионов химических частиц. Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов - радикалов. Спин и спиновая мультиплетность катион-радикалов. Спин и спиновая мультиплетность анион-радикалов.</p>
<p><b>Дифракционные технологии</b> <b>структурной химии</b></p>	<p>Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом рентгеноструктурного анализа/ <math>r</math> - Модель структуры химических частиц вещества. <math>r'</math> – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. <math>r, U</math> – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. <math>r, \rho</math> – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества. Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом электронографии. Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом нейтронографии. Сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа и нейтронографии монокристаллов. Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.</p>

<p>Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии</p>	<p>Спектроскопия и спектроструктурная информация. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с электромагнитным излучением. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с радиоволновым электромагнитным излучением. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с микроволновым электромагнитным излучением. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с инфракрасным электромагнитным излучением. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с ультрафиолетовым электромагнитным излучением. Необходимое и достаточное условие появления полосы в ИК-спектре химических частиц. Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с рентгеновским электромагнитным излучением. Информационно-поисковые системы спектроструктурной химии. Экспертные системы спектроструктурной химии. Безэталонный анализ спектроструктурной химии. Методология установления структуры молекул методами спектроструктурной химии.</p>
<p><b>Методология молекулярного моделирования равновесной структуры химических частиц вещества</b></p>	<p>Поверхность потенциальной энергии и равновесная структура химических частиц вещества. Условия и процедура определения равновесного состояния химических частиц вещества. Алгоритмы оптимизации структуры химических частиц вещества. Методология определения равновесной молекулярной структуры. <b>Поверхность потенциальной энергии и равновесная структура химических частиц вещества</b></p>
<p><b>Методология конформационного анализа химических соединений</b></p>	<p>Основополагающие определения конформационного анализа: конформации и конформеры химических соединений. Конформационная энергия. Задачи конформационного анализа химических соединений. Определение числа конформеров в конформационной смеси. Определение величины барьеров внутреннего вращения. Условие свободного внутримолекулярного вращения функциональных групп химических соединений. Методология определения состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии. Определение состава равновесной смеси конформеров методом спектроструктурной химии. Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов.</p>

	Конформационная номенклатура.
Раздел 2. Партитуру структурной химии надо не просто исполнить, ее надо сочинить!	
Эффекты ионизации химических частиц вещества	<p>Параметры электронодонорных и электроноакцепторных свойства химических частиц вещества. Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии. Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц. Принцип Франка - Кондона. Определение потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии. Орбитальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы. Вертикальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы. Адиабатический потенциал ионизации, структурные изменения химической частиц. Определение энергии сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии. Энергия орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы. Энергия вертикальноно сродства к электрону, структурные изменения химической частицы Энергия адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.</p>
<b>Эффекты поляризации структуры химических соединений</b>	<p>Орбитальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы. Вертикальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы. Адиабатический потенциал ионизации, структурные изменения химической частиц. Определение энергии сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии. Энергия орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы. Энергия вертикальноно сродства к электрону, структурные изменения химической частицы. Энергия адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.</p> <p>К Постоянный электрический дипольный момент химических соединений. Определение состава равновесной смеси конформеров методом дипольных моментов. Индуцированный дипольный момент и поляризуемость химических соединений. олярная поляризация химических частиц вещества. Электронная поляризация химических частиц вещества. Атомная поляризация химических частиц вещества. Ориентационная поляризация химических частиц вещества. Методология экспериментального определения дипольных моментов хими-</p>

	ческих частиц вещества. Методология квантово-химического расчета дипольных моментов химических частиц вещества. онформационная номенклатура.
<b>Концептуальные основы теории химической связи</b>	<p>Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи. Концепция валентности в теории химической связи. Электронно-ионная концепция теории химической связи. Классическая электронная концепция в теории химической связи. Орбитально-зарядовая концепция в теории химической связи. Принцип орбитального соответствия в теории химической связи. Связывающие и антисвязывающие комбинации <math>s</math> – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие <math>\sigma</math>-комбинации <math>p</math> – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие <math>\pi</math>-комбинации <math>p</math> – АО, которые центрированы на атомах А и В. Связывающие и антисвязывающие комбинации <math>s</math> и <math>p</math> – АО, которые центрированы на атомах А и В. Энергия двухатомных взаимодействий (<math>E_{AB}</math>) в приближении Малликена. Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий. Энергия ионных 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. онформационная номенклатура.</p>
<b>Межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества</b>	<p>Межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия химических частиц вещества. Ориентационные взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Индукционные взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Дисперсионные взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Водородная связь. Ассоциаты янус-молекул. Множественные водородные связи. Структурные аспекты Н-ассоциатов. Профили ППЭ Н-ассоциатов. Условие Гамильтона – Айберса для Н-ассоциатов. Длина Н-связи. Изменение длины связи <math>\sim X-H\cdots</math> в Н-ассоциатах. Конфигурация фрагмента <math>\sim X-H\cdots Y\sim</math> в Н-ассоциатах. ИК-спектральные особенности Н-ассоциатов. ЯМР-спектроскопия Н-ассоциатов. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах <math>R\sim X-H\cdots Y\sim R</math>. Дипольный момент Н-ассоциатов. Ион-ионные взаимодействия.</p>



	Ион-дипольные взаимодействия. Катион-π взаимодействия. π - π - Стэкинг взаимодействия
QSAR/QSPR химических частиц вещества.	QSAR/QSPR химических частиц вещества. Прямая и обратная задачи QSAR/QSPR. Методология QSAR/QSPR. Собственный объем (объем Ван-дер-Ваальса) химических частиц. Энергия граничных МО – дескриптор электронной структуры. Электрический заряд на атомах химических частиц – дескриптор электронной структуры. Дипольный момент химических частиц – дескриптор электронной структуры.
Концепция молекулярного распознавания химических частиц вещества на уровне их взаимодействия	<p>Супрамолекулярная самосборка. Спонтанная ассоциация. Самоорганизация. Молекулярное распознавание химических частиц вещества в процессе супрамолекулярных взаимодействий. Молекулярная информация химических частиц вещества. Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов. Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов. Молекулярный докинг химических частиц вещества на уровне их взаимодействий. Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества.</p> <p>Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества. Темплатный эффект. Кинетический темплатный эффект.</p> <p>Термодинамический темплатный эффект. Комплементарность молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия. Динамическая комплементарность молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия. - Стэкинг взаимодействия.</p>
Методология молекулярной механики	Модель и энергия химических частиц в приближении молекулярной механики. Потенциал линейной деформации химических связей в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциал деформации валентных угловых молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциал внутреннего вращения молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциалы невалентных взаимодействий (Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий) в приближении молекулярной механики химических частиц.

	Потенциалы электростатических взаимодействий в приближении молекулярной механики химических частиц. Потенциал Н-связи в приближении молекулярной механики химических частиц. MM+ силовое поле молекулярной механики. AMBER силовое поле молекулярной механики. BIO+ силовое поле молекулярной механики. OPLS силовое поле молекулярной механики. Hyper Chem молекулярная механика.
--	--

## 6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1. Форма обучения – очная, курс – 3, семестр – 6

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Не зная структуры молекулы, нельзя понять ее поведение.	12	12	-	48	72
Концептуальные основы структурной химии	2	2	-	8	12
Электронное состояние химических частиц вещества	2	2	-	8	12
Дифракционные технологии структурной химии	2	2	-	8	12
Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии	2	2	-	8	12
Методология молекулярного моделирования равновесной структуры химических частиц вещества	2	2	-	8	12
Методология конформационного анализа химических соединений	2	2	-	8	12
Раздел 2. Партитуру структурной химии надо не просто исполнить, ее надо сочинить!	14	14	-	62	90
Эффекты ионизации химических частиц вещества	2	2	-	8	12
Эффекты поляризации структуры химических соединений	2	2	-	8	12
Концептуальные основы теории химической связи	2	2	-	8	12
Межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества	2	2	-	8	12
QSAR/QSPR химических частиц вещества.	2	2	-	8	12
Концепция молекулярного распознавания химических частиц вещества на уровне их взаимодействия	2	2	-	11	15
Методология молекулярной механики	2	2	-	11	15
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	26	26	-	110	162

## 7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 7.1. Контрольные вопросы

#### Раздел 1

- 1 Атомно-молекулярная архитектура и молекулярная структура вещества.
- 2 Топологическая и геометрическая модель молекулярной структуры вещества.
- 3 Статическая и динамическая модель молекулярной структуры вещества.
- 4 L, T, I - модель молекулярной структуры конденсированной фазы вещества.
- 5 Влияние агрегатного состояния на молекулярную структуру химических частиц вещества
- 6 Основное и возбужденное электронное состояние химических частиц вещества
- 7 Синглетное электронное состояние химических частиц вещества.
- 8 Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества.
- 9 Триплетное электронное состояние химических частиц вещества.
- 10 Образование и дезактивация электроно-возбужденного состояния химических частиц вещества.
- 11 Внутренняя электронная конверсия – тип электронного перехода.
- 12 Интеркомбинационная электронная конверсия – тип электронного перехода.
- 13 Флуоресценция – тип электронного перехода.
- 14 Фосфоресценция – тип электронного перехода.
- 15 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в триплетном электронном состоянии.
- 16 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в возбужденном синглетном электронном состоянии.
- 17 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в триплетном электронном состоянии.
- 18 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов.
- 19 **Задание для самостоятельной работы**
- 20 Спин и спиновая мультиплетность катионов химических частиц.
- 21 Спин и спиновая мультиплетность анионов химических частиц.
- 22 Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов - радикалов.
- 23 Спин и спиновая мультиплетность катион-радикалов.
- 24 Спин и спиновая мультиплетность анион-радикалов.
- 25 Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом рентгеноструктурного анализ.
- 26  $r$  - Модель структуры химических частиц вещества.
- 27  $r$  – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- 28  $r, U$  – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- 29  $r, \rho$  – Модель молекулярной структуры химических частиц вещества.
- 30 Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом электронографии\
- 31 Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом нейтронографии.



- 32 Сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа и нейтронографии монокристаллов.
  - 33 Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.
  - 34 Спектроскопия и спектроструктурная информация.
  - 35 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с электромагнитным излучением.
  - 36 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с радиоволновым электромагнитным излучением.
  - 37 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с микроволновым электромагнитным излучением.
  - 38 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с инфракрасным электромагнитным излучением.
  - 39 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с ультрафиолетовым электромагнитным излучением.
  - 40 Необходимое и достаточное условие появления полосы в ИК-спектре химических частиц.
  - 41 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с рентгеновским электромагнитным излучением.
  - 42 Информационно-поисковые системы спектроструктурной химии.
  - 43 Экспертные системы спектроструктурной химии.
  - 44 Безэталонный анализ спектроструктурной химии.
  - 45 Методология установления структуры молекул методами спектроструктурной химии.
  - 46 Поверхность потенциальной энергии и равновесная структура химических частиц вещества.
  - 47 Условия и процедура определения равновесного состояния химических частиц вещества.
  - 48 Методология определения равновесной молекулярной структуры.
  - 49 **Поверхность потенциальной энергии и равновесная структура химических частиц вещества**
  - 50 Основопологающие определения конформационного анализа: конформации и конформеры химических соединений.
  - 51 Конформационная энергия.
  - 52 Задачи конформационного анализа химических соединений.
  - 53 Определение числа конформеров в конформационной смеси.
  - 54 Определение величины барьеров внутреннего вращения.
  - 55 Условие свободного внутримолекулярного вращения функциональных групп химических соединений.
  - 56 Методология определения состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии.
  - 57 Определение состава равновесной смеси конформеров методом спектроструктурной химии.
  - 58 Определение состава смеси конформеров методом дипольных моментов.
- Раздел 2.
- 59 Параметры электронодонорных и электроноакцепторных свойства химических частиц вещества.

- 60 Определение потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии.
- 61 Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц.
- 62 Принцип Франка - Кондона.
- 63 Определение потенциалов ионизации химических частиц методами квантовой химии.
- 64 Орбитальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы.
- 65 Вертикальный потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы.
- 66 Адиабатический потенциал ионизации, структурные изменения химической частицы..
- 67 Определение энергии сродства к электрону химических частиц методами квантовой химии.
- 68 Энергия орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
- 69 Энергия вертикальноно сродства к электрону, структурные изменения химической частицы
- 70 Энергия адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
- 71 К Постоянный электрический дипольный момент химических соединений.
- 72 Определение состава равновесной смеси конформеров методом дипольных моментов.
- 73 Индуцированный дипольный момент и поляризуемость химических соединений.
- 74 олярная поляризация химических частиц вещества.
- 75 Электронная поляризация химических частиц вещества\
- 76 Атомная поляризация химических частиц вещества.
- 77 Ориентационная поляризация химических частиц вещества.
- 78 Методология экспериментального определения дипольных моментов химических частиц вещества.
- 79 Методология квантово-химического расчета дипольных моментов химических частиц вещества\
- 80 Концепция электрохимического дуализма в теории химической связи.
- 81 Концепция валентности в теории химической связи.
- 82 Электронно-ионная концепция теории химической связи.
- 83 Классическая электронная концепция в теории химической связи.
- 84 Орбитально-зарядовая концепция в теории химической связи.
- 85 Принцип орбитального соответствия в теории химической связи.
- 86 Связывающие и антисвязывающие комбинации  $s - AO$ , которые центрированы на атомах  $A$  и  $B$ .
- 87 Связывающие и антисвязывающие  $\sigma$ -комбинации  $p - AO$ , которые центрированы на атомах  $A$  и  $B$ .
- 88 Связывающие и антисвязывающие  $\pi$ -комбинации  $p - AO$ , которые центрированы на атомах  $A$  и  $B$ .
- 89 Связывающие и антисвязывающие комбинации  $s$  и  $p - AO$ , которые центрированы на атомах  $A$  и  $B$ .
- 90 Энергия двухатомных взаимодействий ( $E_{AB}$ ) в приближении Малликена.
- 91 Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий.

- 92 Энергия ионных двухатомных взаимодействий.
- 93 Энергия диссоциации химических соединений..
- 94 Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействий в молекулах.
- 95 Теорема Гельмана-Фейнмана.
- 96 Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.
- 97 Теорема вириала и химическая связь.
- 98 Межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества.
- 99 Вандерваальсовы взаимодействия химических частиц вещества.
- 100 Ориентационные взаимодействия Ван-дер-Ваальса.
- 101 Индукционные взаимодействия Ван-дер-Ваальса.
- 102 Дисперсионные взаимодействия Ван-дер-Ваальса.
- 103 Водородная связь.
- 104 Ассоциаты янус-молекул. Множественные водородные связи.
- 105 Структурные аспекты Н-ассоциатов.
- 106 Профили ППЭ Н-ассоциатов.
- 107 Условие Гамильтона – Айберса для Н-ассоциатов.
- 108 Длина Н-связи. энергия энергия
- 109 Изменение длины связи  $\sim X-H \dots$  в Н-ассоциатах.
- 110 Конфигурация фрагмента  $\sim X - H \dots Y \sim$  в Н-ассоциатах.
- 111 ИК- спектральные особенности Н-ассоциатов.
- 112 Дипольный момент Н-ассоциатов.
- 113 Ион-ионные взаимодействия.
- 114 Ион-дипольные взаимодействия.
- 115 Катион- $\pi$  взаимодействия.
- 116  $\pi$  - QSAR/QSPR химических частиц вещества.
- 117 Прямая и обратная задачи QSAR/QSPR.
- 118 Методология QSAR/QSPR.
- 119 Собственный объем (объем Ван-дер-Ваальса) химических частиц
- 120 Энергия граничных МО – дескриптор электронной структуры.
- 121 Электрический заряд на атомах химических частиц – дескриптор электронной структуры.
- 122 Дипольный момент химических частиц – дескриптор электронной структуры.
- 123 Супрамолекулярная самосборка.
- 124 Спонтанная ассоциация.
- 125 Самоорганизация.
- 126 Молекулярное распознавание химических частиц вещества в процессе супрамолекулярных взаимодействий.
- 127 Молекулярная информация химических частиц вещества.
- 128 Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов.
- 129 Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов.
- 130 Молекулярный докинг химических частиц вещества на уровне их взаимодействий.
- 131 Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества.



- 132 Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества.
- 133 Темплатный эффект. Кинетический темплатный эффект.
- 134 Термодинамический темплатный эффект. Комплементарность молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия...
- 135 Принцип двойной комплементарности молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия.
- 136 Динамическая комплементарность молекулярной информации химических частиц вещества на уровне их взаимодействия. - Стэкинг взаимодействия.
- 137 Модель и энергия химических частиц в приближении молекулярной механики.
- 138 Потенциал линейной деформации химических связей в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 139 Потенциал деформации валентных угловых молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 140 Потенциал внутреннего обращения молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 141 Потенциалы невалентных взаимодействий (Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий) в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 142 Потенциалы электростатических взаимодействий в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 143 Потенциал Н-связи в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 144 MM+ силовое поле молекулярной механики. AMBER силовое поле молекулярной механики.
- 145 BIO+ силовое поле молекулярной механики.
- 146 OPLS силовое поле молекулярной механики.
- 147 Общие принципы вычислительного эксперимента в структурной химии.
- 148 Схема технологического цикла вычислительного эксперимента.
- 149 \*\*Свойства моделей «белый ящик», «черный ящик» и «серый ящик».
- 150 Hyper Chem молекулярная механика

## 7.2. Вопросы письменной контрольной работы

- 1 Влияние агрегатного состояния на молекулярную структуру химических частиц вещества
- 2 Основное и возбужденное электронное состояние химических частиц вещества
- 3 Синглетное электронное состояние химических частиц вещества.
- 4 Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества.
- 5 Триплетное электронное состояние химических частиц вещества.
- 6 Образование и дезактивация электроно-возбужденного состояния химических частиц вещества.
- 7 Внутренняя электронная конверсия – тип электронного перехода.
- 8 Интеркомбинационная электронная конверсия – тип электронного перехода.
- 9 Флуоресценция – тип электронного перехода.
- 10 Фосфоресценция – тип электронного перехода.
- 11 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в триплетном электронном состоянии.

- 12 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в возбужденном синглетном электронном состоянии.
- 13 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с парным числом электронов в триплетном электронном состоянии.
- 14 Спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов.
- 15 **Задание для самостоятельной работы**
- 16 Спин и спиновая мультиплетность катионов химических частиц.
- 17 Спин и спиновая мультиплетность анионов химических частиц.
- 18 Спин и спиновая мультиплетность химических частиц вещества с непарным числом электронов - радикалов.
- 19 Спин и спиновая мультиплетность катион-радикалов.
- 20 Спин и спиновая мультиплетность анион-радикалов.
- 21 Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом рентгеноструктурного анали/
- 22 Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом электронографии\
- 23 Концептуальные основы установления молекулярной структуры методом нейтронографии.
- 24 Сравнительные возможности рентгеноструктурного анализа и нейтронографии монокристаллов.
- 25 Влияние кристаллического окружения на молекулярную структуру химических частиц вещества.
- 26 Спектроскопия и спектроструктурная информация.
- 27 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с радиоволновым электромагнитным излучением.
- 28 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с микроволновым электромагнитным излучением.
- 29 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с инфракрасным электромагнитным излучением.
- 30 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с ультрафиолетовым электромагнитным излучением.
- 31 Необходимое и достаточное условие появления полосы в ИК-спектре химических частиц.
- 32 Спектроструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с рентгеновским электромагнитным излучением.
- 33 Информационно-поисковые системы спектроструктурной химии.
- 34 Экспертные системы спектроструктурной химии.
- 35 Конформационная энергия.
- 36 Задачи конформационного анализа химических соединений.
- 37 Определение числа конформеров в конформационной смеси.
- 38 Определение величины барьеров внутреннего вращения.
- 39 Вертикальная и адиабатическая ионизация химических частиц.
- 40 Принцип Франка - Кондона.
- 41 Энергия орбитального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.

- 42 Энергия вертикального сродства к электрону, структурные изменения химической частицы
- 43 Энергия адиабатического сродства к электрону, структурные изменения химической частицы.
- 44 К Постоянный электрический дипольный момент химических соединений.
- 45 Определение состава равновесной смеси конформеров методом дипольных моментов.
- 46 Индуцированный дипольный момент и поляризуемость химических соединений.
- 47 олярная поляризация химических частиц вещества.
- 48 Электронная поляризация химических частиц вещества\
- 49 Атомная поляризация химических частиц вещества.
- 50 Ориентационная поляризация химических частиц вещества.
- 51 Методология экспериментального определения дипольных моментов химических частиц вещества.
- 52 Связывающие и антисвязывающие  $\pi$ -комбинации  $p$  – АО, которые центрированы на атомах А и В.
- 53 Связывающие и антисвязывающие комбинации  $s$  и  $p$  – АО, которые центрированы на атомах А и В.
- 54 Энергия двухатомных взаимодействий ( $E_{AB}$ ) в приближении Малликена.
- 55 Энергия ковалентных двухатомных взаимодействий.
- 56 Энергия ионных двухатомных взаимодействий.
- 57 Энергия диссоциации химических соединений..
- 58 Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно - электронных взаимодействиях в молекулах.
- 59 Теорема Гельмана-Фейнмана.
- 60 Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.
- 61 Теорема вириала и химическая связь.
- 62 онформационная номенклатура.
- 63 Конфигурация фрагмента  $\sim X - H \dots Y \sim$  в Н-ассоциатах.
- 64 ИК- спектральные особенности Н-ассоциатов.
- 65 ЯМР-спектроскопия Н-ассоциатов.
- 66 Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах  $R \sim X - H \dots Y \sim R$ .
- 67 Дипольный момент Н-ассоциатов.
- 68 Ион-ионные взаимодействия.
- 69 Дипольный момент химических частиц – дескриптор электронной структуры.
- 70 Супрамолекулярная самосборка.
- 71 Спонтанная ассоциация.
- 72 Самоорганизация.
- 73 Молекулярное распознавание химических частиц вещества в процессе супрамолекулярных взаимодействий.
- 74 Молекулярная информация химических частиц вещества.
- 75 Кинетическая лабильность супрамолекулярных комплексов.
- 76 Термодинамическая стабильность супрамолекулярных комплексов.



- 77 Молекулярный докинг химических частиц вещества на уровне их взаимодействий.
- 78 Хелатный эффект в процессе молекулярного распознавания химических частиц вещества.
- 79 Макроциклический эффект в процессе молекулярного распознавания
- 80 Потенциал линейной деформации химических связей в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 81 Потенциал деформации валентных угловых молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 82 Потенциал внутреннего обращения молекулярных фрагментов в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 83 Потенциалы невалентных взаимодействий (Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий) в приближении молекулярной механики химических частиц.
- 84 Потенциалы электростатических взаимодействий в приближении молекулярной механики химических частиц.

#### 7.4. Образец содержания экзаменационного билета (при наличии экзамена по дисциплине)

##### Билет 1

1. Электростатическая теорема Гельмана – Фейнмана.
2. Теорема вириала и химическая связь.
3. Межмолекулярные невалентные взаимодействия химических частиц вещества.

#### 8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже. Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

##### 8.1. Семестр 6, очная форма обучения

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-2	Организационно-учебная работа в аудитории	20
	Самостоятельная работа	20
	Контрольная работа	10
ИТОГО		50
Экзамен		50
Общий итог за семестр		100

#### Соответствие баллов оценке

Количество баллов из	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале
----------------------	------	------------------------------

100		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено
75-79	C		зачтено
70-74	D	удовлетворительно	зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

## 9. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В ходе реализации дисциплины используются следующие дополнительные методы обучения, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в зависимости от их индивидуальных особенностей:

- 1) для слепых и слабовидящих:
  - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
  - для выполнения задания при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; возможно также использование собственных увеличивающих устройств;
  - письменные задания оформляются увеличенным шрифтом.
- 2) для глухих и слабослышащих:
  - лекции оформляются в виде электронного документа;
  - письменные задания выполняются на компьютере в письменной форме;
  - экзамен проводится в письменной форме на компьютере; возможно проведение в форме тестирования.
- 3) для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
  - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
  - письменные задания выполняются на компьютере;
  - экзамен и зачёт проводятся в устной форме или выполняются в письменной форме на компьютере.

При необходимости предусматривается увеличение времени для подготовки ответа.

Процедура проведения промежуточной аттестации для обучающихся устанавливается с учётом их индивидуальных психофизических особенностей. Промежуточная аттестация может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.

Обеспечивается доступ к информационным и библиографическим ресурсам в сети Интернет для каждого обучающегося в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

- 1) для слепых и слабовидящих:
  - в печатной форме увеличенным шрифтом;
  - в форме электронного документа;
- 2) для глухих и слабослышащих:
  - в печатной форме;
  - в форме электронного документа.
- 3) для обучающихся с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
  - в печатной форме;
  - в форме электронного документа.

## 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в IX учебном корпусе ДонГУ (г. Донецк, ул. Щорса, 17а). Для проведения лекционных и практических занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете Главного корпуса (ауд.405).

При изучении дисциплины применяются электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

С использованием ресурсов дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

## 11. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

### 11.1. Основная литература

- 1 Туровский Н.А. Строение вещества: теория и практика: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2020 – 151 с
- 2 Туровский Н.А. Практикум по квантовой химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2019. – 145 с
- 3 Туровский Н.А. Практикум по квантовой химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с
- 4 Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технол. направлениям и специальностям / В.Г. Цирельсон. – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2010. – 495 с.
- 5 Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с
- 6 Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с

### 11.2. Дополнительная литература

- 1 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. Research 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.
- 2 <http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4321>
- 3 Ракша, О.В. Информатика, інформаційні технології [Электронный ресурс]: для студ. хим. спец. / О.В. Ракша, О.М. Пастернак, М.А. Туровський; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2011. – 118 с.
- 4 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.

## 12. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. Информиио : электрон. справочник / ООО «РИНФИЦ». – Москва : Издат. дом «Информиио», [2018?– ]. – URL: <https://www.informio.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный.
2. IPR SMART : весь контент ЭБС Ipr books : цифровой образоват. ресурс / ООО «Ай Пи Эр Медиа». – [Саратов : Ай Пи Эр Медиа, 2022]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа: для авториз. пользователей. – Текст. Аудио. Изображения : электронные.
3. Лань : электрон.-библ. система. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: <https://e.lanbook.com/> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный. – Режим доступа: для авторизир. пользователей.
4. СЭБ : Консорциум сетевых электрон. б-к / Электрон.-библ. система «Лань» при поддержке Агентства стратег. инициатив. – Санкт-Петербург : Лань, сор. 2011–2021. – URL: <https://seb.e.lanbook.com/> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа : для пользователей организаций – участников, подписчиков ЭБС «Лань».
5. Book on lime : дистанц. образование / изд-во КДУ МГУ им. М. В. Ломоносова. – Москва : КДУ, сор. 2017. – URL: <https://bookonlime.ru> (дата обращения: 19.05.2023) – Текст . Изображение. Устная речь : электронные.
6. Научная электронная библиотека elibrary.ru : информ.-аналит. портал / ООО Научная электронная библиотека. – Москва : ООО Науч. электрон. б-ка, сор. 2000–2022. – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.
7. Cyberleninka : науч. электрон. б-ка «КиберЛенинка» / [Е. Кисляк, Д. Семячкин, М. Сергеев ; ООО «Итеос»]. – Москва : КиберЛенинка, 2012. – URL: <http://cyberleninka.ru> (дата обращения: 19.05.2023). – Текст : электронный.
8. Электронный каталог Научной библиотеки Донецкого государственного университета. – Донецк : НБ ДонГУ, 1999– . – URL: <http://catalog.donnu.education> (дата обращения: 01.01.2023). – Текст : электронный.

## 13. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы Dream Spark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).