МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра физической и коллоидной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета, доц.

_____ А.И. Вильмс

"10" сентября 2019 г.

Рабочая программа дисциплины Б1.О.30

Наименование дисциплины **СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА**

Направление подготовки **04.03.01 - Химия**

Направленность подготовки: **теоретическая и прикладная химия**

Квалификация выпускника – **БАКАЛАВР**

Форма обучения ***очная***

Согласовано с УМК химического факультета

Протокол № 1 от «09» сентября 2019 г.

Председатель _____ *А.И. Вильмс*

Рекомендовано кафедрой физической и коллоидной химии:

Протокол № 1 от «30» августа 2019 г.

Зав. кафедрой _____ *Шмидт А.Ф.*

Иркутск 2019 г.

Содержание

стр.

1. Цели и задачи дисциплины (модуля)
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП.
3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы
5. Содержание дисциплины (модуля)

5.1 Содержание разделов и тем дисциплины (модуля)

5.2 Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)

5.3 Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий

6. Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов

6.1. План самостоятельной работы студентов

6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

а) основная литература;

б) дополнительная литература;

в) программное обеспечение;

г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
10. Образовательные технологии
11. Оценочные средства (ОС)

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цели:

изучение фундаментальных понятий современной теории химического строения молекул, жидкостей, аморфных веществ, мезофаз и кристаллов.

Задачи:

- разъяснить суть фундаментальных понятий и представлений современной теории химического строения молекул, жидкостей и кристаллов;
- раскрыть роль симметрии при анализе строения молекул и их важнейших свойств;
- рассмотреть основные методы определения электронной и пространственной структуры молекул;
- продемонстрировать возможности теории химического строения для выявления и прогнозирования взаимосвязей между химическим составом, строением и свойствами веществ на молекулярном, супрамолекулярном, жидком и кристаллическом уровнях организации их структуры.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Строение вещества» относится к обязательной части программы естественнонаучного цикла.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами*:*

- Б1.О.10 – «Математика»,
- Б1.О.11 – «Дополнительные главы математики»,
- Б1.О.12 – «Механика и молекулярная физика»,
- Б1.О.13 – «Электричество и магнетизм»,
- Б1.О.14 – «Оптика и строение атома»;
- Б1.О.31 – «Квантовая механика».

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- Б1.В.04 – «Физические методы исследования»,
- Б1.О.18 – «Физико-химические методы анализа»,
- Б1.В.08 – «Анализ сложных объектов»,
- Б1.В.ДВ.05.01 – «Основы анализа органических соединений»,
- Б1.В.ДВ.06.02 – «Избранные главы координационной химии»,
- Б1.В.ДВ.07.01 – «Рентгеноспектральные методы анализа»,
- Б1.В.ДВ.06.01 – «Теория и практическое приложение ЭПР».

Содержание курса входит в необходимый минимум профессиональных знаний выпускников химического факультета. Фундаментальные понятия и представления, рассмотренные в курсе «Строение вещества», будут использоваться в курсах «Физическая химия», «Органическая химия», а также во всех спецкурсах, в которых необходимо учитывать сведения об электронном и пространственном строении химических соединений. В сочетании с другими дисциплинами общего естественнонаучного цикла курс «Строение вещества» призван формировать у студентов целостную систему знаний о природе окружающего мира.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.03.01 «Химия», профиль: теоретическая и прикладная химия:

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	**ОПК-3.1** Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	**Знать**: возможности и границы применимости химических теорий; важнейшие теоретические модели и методы, используемые в химии для определения и анализа пространственной и электронной структуры молекул, жидкостей, и кристаллов; **Уметь**: использовать сведения о симметрии молекул и кристаллов при анализе взаимосвязей между их строением и важнейшими физико-химическими свойствами; обобщать результаты изучения физико-химических свойств веществ и предлагать их интерпретацию с учетом теоретического аппарата физической химии;. **Владеть**: фундаментальными понятиями и представлениями современной теории химического строения молекул, жидкостей и кристаллов
	ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	**Знать**: взаимосвязи между симметрией молекулярных систем, их электрическими и магнитными свойствами; основные составляющие межмолекулярных взаимодействий, зависимости между строением и важнейшими физико-химическими свойствами жидкостей и кристаллов; основы электронного строения твердых тел и поверхностей.

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	**ОПК-3.2** Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	**Уметь**: определять строение несложных органических соединений по данным физико-химических методов (ИК, КР, УФ, масс - спектрометрия, ЯМР, ЭПР). **Владеть**: приемами определения точечных и простейших пространственных групп и использования методов теории групп для описания пространственного и электронного строения молекул. теоретическими представлениями и навыками использования результатов квантово-химических расчетов для предсказании и интерпретации электронно-колебательно-вращательных, ЭПР и ЯМР спектров;

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа,
в том числе 1,5 зачетных единицы, 54 часа на экзамен

Форма промежуточной аттестации: экзамен

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации *(по семестрам)*
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
			Лекции	Семинарские (практические занятия)	Консультации +КСР		
1	Атомно-молекулярная теория строения вещества	6	1	–		1	Собеседование 1
2	Общая характеристика методов исследования вещества	6	1	2		2	КР-1 Собеседование 1
3	Основы теории групп	6	2	2	1	4	Тест-1 Собеседование 2
4	Электронное строение молекул.	6	4	2	1	4	Собеседование 2
5	Взаимодействие света с веществом. Поляризуемость.	6	2	–		–	Собеседование 3
6	Вращение молекул	6	2	2		2	Собеседование 3
7	Колебания молекул	6	4	2	1	3	Собеседование 3
8	Возбужденные состояния	6	2	2		2	Собеседование 4
9	Магнитные свойства молекул	6	4	2		3	Собеседование 5

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации *(по семестрам)*
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
10	Электронное строение КПМ	6	4	2	1	3	Собеседование 6
11	Межмолекулярные взаимодействия	6	4	–	1	2	УО
12	Строение жидкостей	6	2	–		2	УО
13	Электронное строение твердых тел и поверхностей	6	4	2	1	2	Собеседование 7
Итого часов			**36**	**18**	**6**	**38**	Экзамен

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	1. Атомно-молекулярная теория строения вещества	Подготовка к собеседованию № 1		1	Собеседование 1	см. список рекомендуемой литературы (1,4,5,6)
	2. Общая характеристика методов исследования вещества	Подготовка к собеседованию № 1, Решение задач ПР-1		2	ПР-1 Собеседование 1	см. список рекомендуемой литературы (1,2,9)

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	3. Основы теории групп	Интерактивное ознакомление с основными операциями симметрии и типичными точечными группами симметрии молекул.		4	Тест 1, Собеседование 2	см. список рекомендуемой литературы (16)
	4. Электронное строение молекул	Решение задач на построение симметризованных молекулярных орбиталей. Подготовка к собеседованию № 2		4	Собеседование 2	см. список рекомендуемой литературы (1,7,16)
	6. Вращение молекул. Чисто вращательные спектры	Решение задач ПР-3		2	ПР-2, Собеседование-3	см. список рекомендуемой литературы (7-11)
	7. Колебания молекул	Изучение раздела «решение квантово-механической задачи о гармоническом осцилляторе» Подготовка к собеседованию № 3		3	Собеседование-3	см. список рекомендуемой литературы (3,9,12,16)

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	8. Возбужденные состояния молекул	Решение задач по отнесению МО по НП точечной группы. Подготовка к собеседованию № 4		2	ПР-3, Собеседование 4	см. список рекомендуемой литературы (3,4,8,17)
	9. Магнитные свойства молекул	Решение задач на отнесение спектров ЯМР Подготовка к собеседованию № 5		3	Собеседование 5	см. список рекомендуемой литературы (1,11,13)
	10.Электронное строение комплексов переходных металлов	Подготовка к собеседованию № 6		3	Собеседование 6	см. список рекомендуемой литературы (17)
	11. Межмолекулярные взаимодействия	Решение задач Подготовка к экзамену		2	ПР-4 УО	см. список рекомендуемой литературы (1,3,13)
	12. Строение жидкостей	Подготовка к экзамену		2	УО	см. список рекомендуемой литературы (1,13)
	13. Электронное строение твердых тел и поверхностей	Подготовка к собеседованию № 7		2	Собеседование 7	см. список рекомендуемой литературы (15)
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				**30**		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				**30**		

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Атомно-молекулярная теория строения вещества.

   Строение молекул. Длины связей, валентные и торсионные углы. Потенциальные кривые и потенциальные поверхности. Энергия диссоциации двухатомной молекулы – спектроскопическая и химическая. Энергия нулевых колебаний.

2. Общая характеристика методов исследования вещества.

   Дифракционные методы. Спектроскопические методы. Характеристики излучения: длина волны, частота, волновое число. Спектральные диапазоны. Заселенность возбужденных уровней. Уравнение Больцмана. Качественный вид электронно-колебательного и колебательно-вращательного спектров.

3. Основы теории групп.

   Элементы симметрии. Группы элементов симметрии.

   Точечные группы. Представление групп. Неприводимые представления. Таблицы характеров. Формулы приведения. Операторы проектирования.

   Симметрия и матричные элементы. Прямое произведение.

4. Электронное строение молекул.

   Молекулярные орбитали. Энергия МО. Симметрия МО. Построение симметризованных МО молекул H_2O, NH_3, CH_4.

   Ионизация молекул. Вертикальный и адиабатический потенциалы ионизации. Принцип Франка–Кондона. Теорема Купманса. Нарушения теоремы Купманса (релаксация, эффект Яна–Теллера). Фотоэлектронная спектроскопия. Интерпретация ФЭС молекул H_2O, NH_3, CH_4.

5. Взаимодействие света с веществом.

   Интенсивность дипольного излучения. Интеграл дипольного момента перехода. Дипольный момент молекулы. Дипольный момент и симметрия.

   Поляризуемость молекул. Тензор поляризуемости, эллипсоид поляризуемости. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

6. Чисто вращательные спектры.

   Вращательное движение молекул. Моменты инерции. Типы волчков. Вращательный спектр жесткой двухатомной молекулы. Вращательные постоянные. Определение межъядерного расстояния из вращательного спектра. Влияние изотопного замещения. Поправка на нежесткость молекулы.

   Вращательный спектр симметричного волчка. Эффект Штарка.

   Вращательные спектры КР линейных молекул. Спиновые эффекты. Ортоводород и параводород. Спектры O_2, CO_2, N_2.

7. Колебания молекул.

   Структура уровней гармонического осциллятора. Качественный вид собственных функций. Зависимость спектра гармонического осциллятора от прочности связи. Зависимость спектра гармонического осциллятора от массы связанных атомов. Влияние ангармоничности.

Число колебательных степеней свободы многоатомной молекулы. Нормальные координаты и матрица Гессе. Нормальные колебания молекулы воды и CO_2.

Симметрия нормальных колебаний и интенсивность полос ИК и КР. Принцип альтернативного запрета. Колебательные спектры, характеристические частоты, область «отпечатков пальцев». Определение симметрии молекулы по данным ИК и КР спектров.

Колебательно-вращательные спектры. Двухатомные молекулы. Линейные молекулы. Симметричные волчки.

8. Возбужденные состояния молекул.

Характеристики, классификация, обозначения возбужденных состояний. Классификация электронных переходов. Хромофоры и ауксохромы. Батохромный и гипсохромный сдвиг.

Спектры электронных переходов. Интенсивность переходов и правила отбора. Электронный, спиновый и франк-кондоновский факторы. Вибронные переходы.

Разрешенные и запрещенные $\pi \rightarrow \pi^*$ переходы в молекуле бутадиена.

Люминесценция. Закон Стокса-Ломмеля. Правило Левшина. Фосфоресценция, диаграммы Яблонского.

9. Магнитные свойства молекул.

Эффект Зеемана. Угловой и спиновый момент. Магнитный момент. Магнетон Бора. Ларморова прецессия. Магниторезонансная спектроскопия: ЭПР и ЯМР.

Спектры ЭПР: g-фактор. Тонкая и сверхтонкая структура спектров.

Спектры ЯМР. Химический сдвиг. Интенсивность сигнала. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов. КССВ.

10. Электронное строение комплексов переходных металлов.

Теория кристаллического поля. Комплексы сильного и слабого поля. Спектрохимический ряд. Магнитные свойства КПМ. Спектры электронных переходов.

Стабилизация кристаллическим полем. Гидратные комплексы $[M(H_2O)_6]^+$. Нормальные и обращенные шпинели.

Теория поля лигандов.

Теорема Яна–Теллера. Проявления эффекта Яна–Теллера в КПМ.

11. Межмолекулярные взаимодействия.

Энергия ковалентного взаимодействия. Потенциал Леннард-Джонса.

Кулоновское взаимодействие заряженных частиц. Ионные кристаллы. Энергия решетки. Постоянная Маделунга. Электростатическая свободная энергия иона по Борну, энергия сольватации иона. Зависимость растворимости ионов от полярности среды. Борновская энергия диполя.

Ион-дипольное взаимодействие. Диполь-дипольное взаимодействие. Усреднение по вращениям: энергия Кеезома. Взаимодействия, связанные с поляризуемостью.

Дисперсионные силы. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия.

Силы отталкивания. Ван-дер-Ваальсовы радиусы. Плотная упаковка, и температура плавления.

12. Строение жидкостей.

Функция распределения. Водородные связи. Структура жидкой воды, «память» воды.

13. Электронное строение твердых тел.

Модель свободных электронов: сплошной спектр, плотность состояний, уровень Ферми. Зоны в кристалле: функции Блоха, зона Бриллюэна. Проводники, полупроводники и диэлектрики.

Одномерные системы. Зона Бриллюэна для полиена. Зонная структура цианоплатинатов, проводимость, плотность состояний.

Приведенные зоны. Пайерлсовское искажение в одномерной цепочке. Заслоненные и шахматные стопки $[PtL_4]^{2-}$.

Зонная структура поверхности. Адсорбция CO на поверхности металла. Взаимодействие МО с зоной: сходство и различие с взаимодействием ВЗМО–НВМО. Активационный барьер хемосорбции. Диссоциативная адсорбция.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**
1	2	Характеристики излучения	2	ПР-1 Собеседование 1	ОПК-3
2	3	Элементы симметрии. Точечные группы симметрии	2	Тест 1, Собеседование 2	ОПК-3
3	4	Симметрия молекулярных орбиталей	2	Собеседование 2	ОПК-3
4	6	Интерпретация вращательных спектров поглощения и комбинационного рассеяния	2	ПР-2, Собеседование-3	ОПК-3
5	7	Симметрия нормальных колебаний. Анализ колебательно-вращательного спектра.	2	Собеседование-3	ОПК-3
6	8	Разрешенные и запрещенные $\pi \rightarrow \pi^*$ переходы в молекуле бутадиена	2	ПР-3, Собеседование 4	ОПК-3
7	9	Интерпретация спектров ЯМР простых органических молекул	2	Собеседование 5	ОПК-3
8	10	Электронное строение комплексов переходных металлов	2	Собеседование 6	ОПК-3
9	13	Электронное строение стопок цианоплатинатов	2	Собеседование 7	ОПК-3

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ пп/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	1, 2	Решение задач ПР-1. Проработка контрольных вопросов собеседования № 1 (см. вопросы текущего контроля).	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
2	3, 4	Отработка навыков определения точечной группы симметрии молекулы. Проработка контрольных вопросов собеседования № 2	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
3	6, 7	Решение задач по вращательной спектроскопии (ПР-2) Проработка контрольных вопросов собеседования № 3	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
4	8	Решение задач на отнесение МО к НП точечной группы симметрии молекулы (ПР-3). Проработка контрольных вопросов собеседования № 4	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
5	9	Решение задач на отнесение спектров ЯМР Проработка контрольных вопросов собеседования № 5	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
6	10	Проработка контрольных вопросов собеседования № 6	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
7	11	Решение задач (ПР-4)	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2
8	13	Проработка контрольных вопросов собеседования № 7	ОПК-3	ОПК-3.1 ОПК-3.2

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решении задач и подготовке к коллоквиумам проводится во внеаудиторное время.

Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях и задачниках.

4.4. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)

Выполнение курсовых работ не планируется

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература

1. Практикум по физической химии. Физические методы исследования : учеб. пособие / под ред.: М. Я. Мельникова, Е. П. Агеева, В. В. Лунина. - М. : Академия, 2014. - 526 с.
2. Калашников, Н. П. Практикум по решению задач по общему курсу физики. Основы квантовой физики. Строение вещества. Атомная и ядерная физика / Н. П. Калашников. - Москва : Лань", 2014. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань".

3. Левшин Л.В. Оптические методы исследования молекулярных систем: учеб. пособие / Л. В. Левшин, А. М. Салецкий. - М. : Изд-во МГУ, 1994.– Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех".
4. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учеб. пособие.–М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.– 495 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».

б) дополнительная литература

5. Шипунов, Б.П. Строение вещества : учеб. пособие: В 2 ч. / Б. П. Шипунов. - Барнаул : Изд-во Алт. гос. ун-та, 2007. - Ч. 1. - 218 с.
6. Плюснин, В.Ф. Краткий курс строения вещества : сб. задач / В. Ф. Плюснин, Н. М. Бажин, Н. И. Сорокин ; Новосибирский гос. ун-т, Фак. естеств. наук. - Новосибирск : Изд-во НГУ, 2007. - 213 с.
7. Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии : учеб. пособие / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - М. : Мир : Бином. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с.
8. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии: учебник / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. - М. : Мир : АСТ, 2003. - 683 с.
9. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии: Пер. с англ.– М.: Мир, 1985.– 384 с.
10. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия.– М.: Эдиториал УРСС, 2001.– 896 с.
11. Бёккер Ю. Спектроскопия: пер. с нем. – М.: Техносфера, 2009.– 528 с.
12. Харгиттаи И. Симметрия глазами химика : Пер. с англ. / И. Харгиттаи, М. Харгиттаи.– М.: Мир, 1989.– 496 с.
13. Израелашвили Дж. Межмолекулярные и поверхностные силы: Пер. с англ. / Дж. Израелашвили.– М.: Научный мир, 2011.– 456 с.
14. Нифантьев И.Э. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса / И.Э. Нифантьев, П.В. Ивченко.– М.: Изд-во МГУ, 2006.– 200 с.
15. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей: Взгляд химика-теоретика: Пер. с англ.– М.: Мир, 1990.–216 с.

г) список авторских методических разработок: (

16. Витковская Н.М. Основы теории групп и ее химические приложения: учеб. пособие / Н.М. Витковская, В.Б. Кобычев.– Иркутск : Аспринт, 2014. - 107 с.

д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

17. http://symmetry.otterbein.edu/index.html
    Англоязычный обучающий ресурс, позволяющий освоить технику определения точечной группы симметрии молекул, в том числе для достаточно сложных систем.
18. http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/kovba-pupyshev/welcome.html
    В.М.Ковба, В.И.Пупышев Двухатомные молекулы: спектры и молекулярные постоянные.

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.
- компьютерный класс химического факультета (ауд. 209) оборудован 12 ПК Intel Pentium IV с установленным пакетом MS Office. Имеется локальная сеть.

6.2. Программное обеспечение:

Лицензируемое ПО:

- MS Excel в составе MS Office - 2016

Свободно распространяемые программы:

- Firefly – программа неэмпирических расчетов [Alex A. Granovsky, Firefly version 8, www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html];
- Molecular Modeling and Simulation Kit (MaSK) для визуализации результатов расчетов Firefly, наглядного представления строения молекул и вида МО.

6.3. Технические и электронные средства:

Все читаемые лекции сопровождаются презентациями, доступными для студентов в системе ЭИОС ИГУ.

При подготовке иллюстративного материала использованы перечисленные выше программные средства – MS Office, Firefly, MASK.

VII.ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. При прохождении дисциплины «Квантовая механика» предусмотрены:

1) лекции с применением

а) технологий объяснительно-иллюстративных объяснений.

б) объяснительно-иллюстративного метода с элементами проблемного изложения;

в) разбора конкретных ситуаций.

2) практические занятия, во время которых студентами закрепляются навыки решения задач, связанных с молекулярной спектроскопией, образованием конденсированной фазы, а также описанием электронного строения твердых тел, Во время сдачи коллоквиумов обсуждаются вопросы лекций, проводится решение типовых и ситуационных задач;

3) самостоятельная работа студентов, включающая подготовку к практическим занятиям в форме изучения теоретического материала лекций и анализа типовых решений с использованием средств табличного процессора EXCEL, подготовку к текущему контролю успеваемости;

4) консультирование студентов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

К *активным формам обучения* относятся:

- Контрольные вопросы и мини-дискуссии в ходе изложения лекционного материала. Такие «спонтанные» обсуждения (на самом деле, конечно же, планируемые) способствуют построению связей между различными частями читаемого курса и формированию целостной картины курса в целом.
- Групповое обсуждение сложных вопросов курса и типичных ошибок при выполнении проверочных работ.

Наименование тем занятий с использованием активных форм обучения:

	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
1	Характеристики излучения	практич.	собеседование / групповая дискуссия	2
2	Элементы симметрии. Точечные группы симметрии	практич	собеседование / групповая дискуссия	2
3	Симметрия молекулярных орбиталей	практич	собеседование / групповая дискуссия	2
	Интерпретация вращательных спектров поглощения и комбинационного рассеяния	практич	собеседование / групповая дискуссия	2
	Симметрия нормальных колебаний. Анализ колебательно-вращательного спектра.	практич	собеседование / групповая дискуссия	2

	Разрешенные и запрещенные $\pi \rightarrow \pi^*$ переходы в молекуле бутадиена	практич	собеседование / групповая дискуссия	2
	Интерпретация спектров ЯМР простых органических молекул	практич	собеседование / групповая дискуссия	2
	Электронное строение комплексов переходных металлов	практич	собеседование / групповая дискуссия	2
	Электронное строение стопок цианоплатинатов	практич	коллоквиум	2
Итого часов				18

VIII.ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№ п\п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
	Выполнение письменной проверочной работы (ПР), собеседование	Атомно-молекулярная теория строения вещества Общая характеристика методов исследования вещества	ОПК-3
	Выполнение ПР, собеседование	Основы теории групп	ОПК-3
	Тест, собеседование	Электронное строение молекул	ОПК-3
	Выполнение ПР, Собеседование	Вращение молекул. Чисто вращательные спектры	ОПК-3
	Собеседование	Колебания молекул	ОПК-3
	Выполнение ПР, собеседование	Возбужденные состояния молекул	ОПК-3
	Собеседование	Магнитные свойства молекул	ОПК-3
	Собеседование	Электронное строение комплексов переходных металлов	ОПК-3
	Выполнение ПР, собеседование	Межмолекулярные взаимодействия	ОПК-3
	собеседование	Электронное строение твердых тел и поверхностей	ОПК-3
	Экзамен		ОПК-3

Демонстрационный вариант ПР № 1

1. Характерная полоса поглощения алкинов, связанная с колебанием С–Н связи, расположена в области 3300 $см^{-1}$. Рассчитайте длину соответствующей волны λ в нанометрах.
2. Длина волны, поглощаемой при некотором переходе, составляет 500 нм. К какому спектральному диапазону относится этот переход? Найдите для него волновое число, частоту и энергию перехода в кДж/моль.
3. Частота «ножничного» колебания молекулы воды расположена в области 1650 $см^{-1}$. Рассчитайте длину соответствующей волны λ в нанометрах.

Демонстрационный вариант ПР № 2

1. Вращательный спектр $^{79}Br^{19}F$ состоит из серии эквидистантных линий, расположенных на расстоянии 0,71433 $см^{-1}$ друг от друга. Рассчитайте вращательную постоянную B. Найдите длину связи в молекуле. Определите волновое число для перехода J = 9 →J =10.
2. Вращательная постоянная $H^{35}Cl$ равна 10,5909 $см^{-1}$. Чему равно *B* для $H^{37}Cl$ и $^{2}D^{35}Cl$?
3. Три последовательные линии вращательного спектра молекулы $H^{79}Br$ наблюдаются при 84,544, 101,355 и 118,112 $см^{-1}$. Определите, каким переходам $J \rightarrow J'$ они соответствуют. Вычислите *B* и *D*.
4. Вращательный спектр $H^{127}I$ состоит из серии эквидистантных линий, расположенных на расстоянии 12,8 $см^{-1}$ друг от друга. Рассчитайте вращательную постоянную B. Найдите длину связи в молекуле.

Демонстрационный вариант ПР № 3

Рассмотрите МО молекулы формальдегида. Найдите *n*, π и π* МО, определите, к каким НП точечной группы они относятся. Будет ли разрешен или запрещен $n \leftarrow \pi^*$ переход в этой молекуле?

Демонстрационный вариант ПР № 4

1. Рассчитайте энергию взаимодействия (в ккал/моль) ионов Na^+ и Cl^- на расстоянии ионных радиусов (2,76 Å) в вакууме, бензоле (ε = 2,3) этаноле (ε = 24,3), воде (ε = 78,5).

   Диэлектрическая проницаемость вакуума равна $8{,}854 \cdot 10^{-12}$ $Кл^2$ $Дж^{-1}$ $м^{-1}$
2. Оцените энергию сольватации NaCl по Борну в воде (ε = 78,5) и ацетоне (ε = 21). Примите ионные радиусы Na^+ и Cl^- равными 0.095 и 0.181 нм.
3. Удельная теплота плавления твердого аргона составляет 29,48 кДж/кг, а удельная теплота кипения – 163,5 кДж/кг. На основании правила Трутона оцените температуру кипения жидкого аргона.

Демонстрационный вариант теста №1

Определите точечную группу симметрии молекулы этана в заслоненной конформации. Для нахождения элементов симметрии используйте программу MASK.

Вопросы для собеседования № 1

Атомно-молекулярная теория строения вещества.

Общая характеристика методов исследования вещества.

1. Строение молекул. Длины связей, валентные и торсионные углы. Охарактеризуйте торсионные углы Cl-C-C-Cl для устойчивых конформаций 1,2-дихлорэтана.
2. Приближение Борна-Оппенгеймера. Потенциальные кривые. Спектроскопическая энергия диссоциации двухатомной молекулы. Постройте на одном графике потенциальные кривые диссоциации молекул H2 (Едисс = 451 кДж/моль), F2 (Едисс = 451 кДж/моль), и HF (Едисс = 451 кДж/моль). Значения равновесных длин связи найдите самостоятельно.
3. Химическая энергия диссоциации двухатомной молекулы. Энергия нулевых колебаний.
4. Потенциальные поверхности. Как будет выглядеть ППЭ для молекулы воды, если считать, что оба расстояния О–Н всегда равны друг другу? Какова размерность гиперповерхности для молекулы воды в общем случае?
5. Дифракционные методы. Почему молекулу невозможно исследовать под микроскопом? Что исследуют с применением рентгеноструктурного анализа? Какие экспериментальные и теоретические сложности при этом возникают?
6. Каковы преимущества газовой электронографии? Какой длине волны соответствует энергия электрона, разгоняемого при разности потенциалов 10000 эВ? 50000 эВ?
7. Каковы преимущества нейтронографии? Что препятствует повсеместному применению этого метода?
8. Спектроскопические методы. Что отличает спектроскопические методы от дифракционных?
9. Характеристики излучения: длина волны, частота, волновое число. Спектральные диапазоны.
10. Заселенность возбужденных уровней. Уравнение Больцмана. Качественный вид электронно-колебательного и колебательно-вращательного спектров. Почему для колебательно-вращательных спектров характерно наличие двух ветвей, а для электронно-колебательных – только одной?

Вопросы для собеседования № 2

Электронное строение молекул. Фотоэлектронная спектроскопия.

1. Основные приближения метода МО ЛКАО. Молекулярные орбитали. Энергия МО.
2. Симметрия МО. Построение симметризованных МО молекулы H_2O. Формула приведения. Операторы проектирования.
3. Построение симметризованных МО молекулы NH_3. Какая точечная группа соответствует молекуле аммиака? Каким НП точечной группы отвечают АО атома азота? Как запишутся характеры приводимого представления для трех АО атомов водорода? На какие НП разбивается данное приводимое представление? Постройте симметризованные линейные комбинации АО атомов водорода. Выполните ортогонализацию вырожденных МО по Шмидту. Какого порядка следования МО следует ожидать, исходя из их узловой структуры?
4. Построение симметризованных МО молекулы CH_4. Какая точечная группа соответствует молекуле метана? Каким НП точечной группы отвечают АО атома углерода? Как запишутся характеры приводимого представления для четырех АО атомов водорода? На

какие НП разбивается данное приводимое представление? Какова максимальная кратность вырождения уровней в молекуле метана?

5. Ионизация молекул. Вертикальный и адиабатический потенциалы ионизации. Принцип Франка–Кондона. Теорема Купманса. Нарушения теоремы Купманса (релаксация, эффект Яна–Теллера).
6. Фотоэлектронная спектроскопия. Интерпретация ФЭС молекул H_2O, NH_3, CH_4. Объясните количество и форму наблюдаемых полос в спектрах. Ионизацией с каких МО обусловлена каждая из полос?

Вопросы для собеседования № 3

Колебательная, вращательная и колебательно-вращательная спектроскопия

1. Интенсивность дипольного излучения. Интеграл дипольного момента перехода. Дипольный момент молекулы. Дипольный момент и симметрия.
2. Поляризуемость молекул. Тензор поляризуемости, эллипсоид поляризуемости. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
3. Чисто вращательные спектры. Вращательное движение молекул. Моменты инерции. Типы волчков. Вращательный спектр жесткой двухатомной молекулы. Вращательные постоянные. Определение межъядерного расстояния из вращательного спектра. Влияние изотопного замещения. Поправка на нежесткость молекулы.
4. Вращательный спектр симметричного волчка. Эффект Штарка.
5. Вращательные спектры КР линейных молекул. Спиновые эффекты. Ортоводород и параводород. Спектры O_2, CO_2, N_2.
6. Колебания молекул. Структура уровней гармонического осциллятора. Качественный вид собственных функций. Зависимость спектра гармонического осциллятора от прочности связи. Зависимость спектра гармонического осциллятора от массы связанных атомов. Влияние ангармоничности.
7. Число колебательных степеней свободы многоатомной молекулы. Нормальные координаты и матрица Гессе. Нормальные колебания молекулы воды и CO_2.
8. Симметрия нормальных колебаний и интенсивность полос ИК и КР. Принцип альтернативного запрета. Колебательные спектры, характеристические частоты, область «отпечатков пальцев». Определение симметрии молекулы по данным ИК и КР спектров.
9. Колебательно-вращательные спектры. Двухатомные молекулы. Линейные молекулы. Симметричные волчки.

Вопросы для собеседования № 4

Возбужденные состояния молекул.

1. Возможные формы и взаимное расположение потенциальных кривых основного и возбужденных состояний. Несвязанные возбужденные состояния. Характеристики состояний (структура, спин, мультиплетность, время жизни).
2. Классификация состояний по энергии, по симметрии, по заполнению МО.
3. Обозначения возбужденных состояний. Классификация состояний двухатомных молекул. Классификация состояний молекулы водорода. Какой терм соответствует состоянию ($1s\sigma_g 2p\sigma_g$) молекулы водорода?

4. Классификация электронных переходов.
5. Классификация Малликена. В чем отличие N→Q переходов от N→V переходов? Нарисуйте соответствующие потенциальные кривые, предскажите различие в форме соответствующих полос электронно-колебательного спектра.
6. Классификация Каша. Основные типы электронных переходов. К какому типу классификации Малликена относятся $n \to \pi^*$ и $\pi \to \pi^*$ в молекуле формальдегида?
7. Покажите, что в результате $n \to \pi^*$ перехода в молекуле формальдегида образуется состояние $^1A_2$. Какое состояние образуется в результате и $\pi \to \pi^*$ перехода ?
8. Хромофоры и ауксохромы. Батохромный и гипсохромный сдвиг.
9. Спектры электронных переходов. Интенсивность переходов и правила отбора. Рассмотрите интеграл $\int \Psi_1^* \boldsymbol{\mu} \Psi_0 d\tau$, выделите электронный, спиновый и франк-кондоновский факторы. Почему в результате $n \to \pi^*$ перехода в молекуле формальдегида образуется состояние $^1A_2$, а не $^3A_2$?
10. Разрешенные и запрещенные $\pi \to \pi^*$ переходы в молекуле бутадиена. В каком случае интеграл дипольного момента перехода отличен от нуля? Будет ли разрешен или запрещен $n \to \pi^*$ переход в молекуле формальдегида? Почему он все-таки наблюдается в спектре? Что такое вибронные переходы?

Вопросы для собеседования № 5

Магнитные свойства молекул

1. Эффект Зеемана. Угловой и спиновый момент.

   Выведите коммутационные отношения между операторами проекций углового момента. Покажите, что квадрат углового момента и любая его компонента могут быть измерены одновременно. Что при этом будет известно о двух других составляющих?
   Что является собственными функциями и собственными значениями оператора проекции углового момента на *z*? Что является собственными функциями и собственными значениями оператора квадрата углового момента? Какова кратность вырождения при заданном *l*? Чему равна величина S^2 для электрона?
2. Магнитный момент.

   Гиромагнитное отношение. Магнетон Бора. Ядерный магнетон, его величина для ядра ^1H.
3. Ларморова прецессия.

   Частота ларморовой прецессии. Два подхода к измерению резонансной частоты. Сравните характерные частоты электронного и протонного резонанса. Магниторезонансная спектроскопия: ЭПР и ЯМР.
4. Спектры ЭПР.

   Какова типичная величина расщепления энергетического уровня электрона под действием поля 0,33 Тл? Каково при этом соотношение заселенностей уровней при комнатной температуре? Почему все-таки удается наблюдать спектры ЭПР? Что такое спин-решеточная релаксация?
   g-Фактор. Чем объяснить, во многих случаях g-фактор близок к величине 2,00232 для свободного электрона?
   Тонкая и сверхтонкая структура спектров.
   Чем обусловлена тонкая структура спектров ЭПР? Сколько линий будет в спектре для

Mn^{2+} ($^6S_{5/2}$)? Для Fe^{2+} ($^5D_2$)?
Чем обусловлена СТС спектров ЭПР? Какие ядра чаще всего выступают в качестве источника СТС? Предскажите структуру сигнала анион-радикала циклооктатетраена. Каково должно быть соотношение между интенсивностями пиков?
Проанализируйте спектр низкого разрешения радикала $(CH_2OH)^{\cdot}$. Где преимущественно локализован неспаренный электрон? На основании чего сделан такой вывод? Предскажите вид спектра $(CH_2OH)^{\cdot}$ при высоком разрешении. Будет ли спектр анион-радикала бутадиена представлен триплетом квинтетов или квинтетом триплетов (Вид МО бутадиена рассматривался нами неоднократно)?

5. Спектры ЯМР.

Химический сдвиг. Чем обусловлен химический сдвиг сигнала? Расположите в порядке возрастания х.с. относительно ТМС: бензол, циклогексан, 1,4-диоксан, ацетон, диметилсульфоксид, трихлороацетальдегид,
Как зависит величина х.с. от рабочей частоты? Почему для химического сдвига используются такие единицы, как м.д.?
Интенсивность сигнала. Спин-спиновое взаимодействие и мультиплетность сигналов. Предскажите вид ЯМР-спектра этанола.
Константы спин-спинового взаимодействия, геминальные, вицинальные и дальнодействующие КССВ. В чем измеряются КССВ? Как они зависят от рабочей частоты? Применение КССВ для анализа структуры.

Вопросы для собеседования № 6

Электронное строение комплексов переходных металлов

1. Связь симметрии октаэдра и тетраэдра с симметрией куба. Симметрия *d*-АО центрального атома.
2. Теория кристаллического поля. Величина расщепления Δ в различном окружении. Почему расщепление в поле тетраэдра вдвое меньше, чем в поле куба? Как изменится картина уровней при удалении одного из лигандов октаэдрического комплекса? При переходе к плоскоквадратному комплексу?
3. Комплексы сильного и слабого поля. Спектрохимический ряд. Магнитные свойства КПМ. В каких случаях образуются высокоспиновые и низкоспиновые комплексы? Как экспериментально отличить высокоспиновые комплексы от низкоспиновых?
4. Теорема Яна–Теллера. Проявления эффекта Яна–Теллера в КПМ.
5. Спектры электронных переходов. Запрет Лапорта. Почему тетраэдрические комплексы обычно окрашены ярче октаэдрических? Чем объяснить наличие плеча в спектре поглощения [Ti(H2O)6]3+?
6. Стабилизация кристаллическим полем. Гидратные комплексы $[M(H_2O)_6]^+$. Нормальные и обращенные шпинели. Образования какого типа шпинели следует ожидать в случае $ZnAlO_2$?
7. Теория поля лигандов. Чем объяснить, что заряженный F^- создает более слабое поле, чем нейтральный CO?

Вопросы для собеседования № 7

Электронное строение твердых тел и поверхностей.

1. Модель свободных электронов

Сплошной спектр электронного газа, плотность состояний, уровень Ферми. Зоны в кристалле: функции Блоха, зона Бриллюэна, запрещенная зона. Проводники, полупроводники и диэлектрики.

2. Одномерные системы.

   Энергетические уровни циклического полиена, диаграммы Фроста. Зона Бриллюэна для полиена. Функции Блоха, число узлов *k*-и функции.

3. Зонная структура цианоплатинатов.

   Постройте схему энергетических уровней валентных 5*d*- и вакантных 6*p*-АО изолированного плоскоквадратного комплекса $[PtL_4]^{2-}$. Постройте зонную структуру для заслоненной стопки $[PtL_4]^{2-}$. Рассмотрите узловую структуру функций Блоха при $k = 0$ для $d(z^2)$ и p_z орбиталей. Почему при переходе к $k = \pi/a$ энергия *d* повышается, а энергия p_x понижается? Почему d_{xz} и d_{yz} образуют более широкую зону, чем d_{xy}? Чем объяснить возникновение проводимости стопок $[Pt(CN)_4]^{2-}$ при окислении?

4. Приведенные зоны. Пайерлсовское искажение в одномерной цепочке. Заслоненные и шахматные стопки $[PtL_4]^{2-}$.

5. Зонная структура поверхности.

   Особые точки зон поверхности (Г, X, M). Построение зонной структуры поверхности. Адсорбция CO на поверхности металла. Взаимодействие МО с зоной: сходство и различие с взаимодействием ВЗМО–НВМО. Активационный барьер хемосорбции. Диссоциативная адсорбция.

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. Атомно-молекулярная теория строения вещества. Строение молекул. Длины связей, валентные и торсионные углы. Потенциальные кривые и потенциальные поверхности. Энергия диссоциации двухатомной молекулы – спектроскопическая и химическая. Энергия нулевых колебаний.
2. Структура уровней гармонического осциллятора. Качественный вид собственных функций. Зависимость спектра гармонического осциллятора от прочности связи. Зависимость спектра гармонического осциллятора от массы связанных атомов. Влияние ангармоничности.
3. Общая характеристика методов исследования вещества. Дифракционные методы. Спектроскопические методы.
4. Характеристики излучения: длина волны, частота, волновое число. Спектральные диапазоны.
5. Заселенность возбужденных уровней. Уравнение Больцмана. Качественный вид электронно-колебательного и колебательно-вращательного спектров.
6. Электронное строение молекул. Молекулярные орбитали. Энергия МО. Симметрия МО. Построение симметризованных МО молекулы H2O. Формулы приведения. Операторы проектирования.
7. Электронное строение молекул. Молекулярные орбитали. Энергия МО. Симметрия МО. Построение симметризованных МО молекулы NH3. Формулы приведения. Операторы проектирования.
8. Электронное строение молекул. Молекулярные орбитали. Энергия МО. Симметрия МО. Построение симметризованных МО молекулы CH4. Формулы приведения. Операторы проектирования.

9. Ионизация молекул. Вертикальный и адиабатический потенциалы ионизации. Теорема Купманса. Нарушения теоремы Купманса (релаксация, эффект Яна–Теллера).
10. Фотоэлектронная спектроскопия. Принцип Франка–Кондона. Интерпретация ФЭС молекул H2O, NH3, CH4.
11. Взаимодействие света с веществом. Дипольный момент молекулы. Дипольный момент и симметрия. Интенсивность дипольного излучения.
12. Поляризуемость молекул. Тензор поляризуемости, эллипсоид поляризуемости. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
13. Вращательное движение молекул. Моменты инерции. Типы волчков.
14. Вращательный спектр жесткой двухатомной молекулы. Вращательные постоянные. Определение межъядерного расстояния из вращательного спектра. Влияние изотопного замещения. Поправка на нежесткость молекулы.
15. Вращательные спектры КР линейных молекул. Спиновые эффекты. Ортоводород и параводород. Спектры O2, CO2, N2.
16. Симметрия и матричные элементы. Прямое произведение. Интеграл дипольного момента перехода.
17. Колебания молекул. Число колебательных степеней свободы многоатомной молекулы. Нормальные координаты и матрица Гессе.
18. Нормальные колебания молекулы воды. Формулы приведения. Операторы проектирования.
19. Число колебательных степеней свободы многоатомной молекулы. Нормальные колебания молекулы CO2.
20. Симметрия нормальных колебаний и интенсивность полос ИК и КР. Определение симметрии молекулы по данным ИК и КР спектров. Принцип альтернативного запрета.
21. Колебательные спектры, характеристические частоты, область «отпечатков пальцев».
22. Колебательно-вращательные спектры. Двухатомные молекулы. Линейные молекулы. Симметричные волчки.
23. Возбужденные состояния молекул. Характеристики, классификация, обозначения. Классификация электронных переходов. Хромофоры и ауксохромы. Батохромный и гипсохромный сдвиг.
24. Спектры электронных переходов. Интенсивность переходов и правила отбора. Электронный, спиновый и франк-кондоновский факторы. Вибронные переходы.
25. Люминесценция. Принцип Франка–Кондона. Закон Стокса-Ломмеля. Правило Левшина. Фосфоресценция, диаграммы Яблонского.
26. Магнитные свойства молекул. Эффект Зеемана. Угловой и спиновый момент. Магнитный момент. Магнетон Бора. Ларморова прецессия. Магниторезонансная спектроскопия: ЭПР и ЯМР.
27. Спектры ЭПР: g-фактор. Тонкая и сверхтонкая структура спектров.
28. Спектры ЯМР. Химический сдвиг. Интенсивность сигнала. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов. КССВ.
29. Электронное строение комплексов переходных металлов. Теория кристаллического поля. Комплексы сильного и слабого поля. Спектрохимический ряд. Магнитные свойства комплексов переходных металлов. Спектры электронных переходов.

30. Электронное строение комплексов переходных металлов. Спектрохимический ряд. Теория поля лигандов.
31. Теорема Яна–Теллера. Проявления эффекта Яна–Теллера в комплексах переходных металлов.
32. Межмолекулярные взаимодействия. Потенциал Леннард-Джонса.
33. Кулоновское взаимодействие заряженных частиц. Ионные кристаллы. Энергия решетки. Постоянная Маделунга.
34. Электростатическая свободная энергия иона по Борну, энергия сольватации иона. Зависимость растворимости ионов от полярности среды. Борновская энергия диполя.
35. Ион-дипольное взаимодействие. Диполь-дипольное взаимодействие. Усреднение по вращениям: энергия Кеезома.
36. Межмолекулярные взаимодействия, связанные с поляризуемостью.
37. Дисперсионные силы. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия.
38. Межмолекулярные взаимодействия: силы отталкивания. Ван-дер-Ваальсовы радиусы. Плотная упаковка, и температура плавления.
39. Строение жидкостей. Функция распределения. Водородные связи. Структура жидкой воды, «память» воды.
40. Электронное строение твердых тел. Модель свободных электронов: сплошной спектр, плотность состояний, уровень Ферми. Зоны в кристалле: функции Блоха, зона Бриллюэна. Проводники, полупроводники и диэлектрики.
41. Электронное строение твердых тел: одномерные системы. Зона Бриллюэна для полиена. Приведенные зоны. Пайерлсовское искажение в одномерной цепочке.
42. Зонная структура цианоплатинатов, проводимость, плотность состояний. Заслоненные и шахматные стопки [PtL4]2–.
43. Зонная структура поверхности. Адсорбция CO на поверхности металла.
44. Взаимодействие MO с зоной. Активационный барьер хемосорбции.

Разработчики:

_____	профессор	В.Б. Кобычев
(подпись)	(занимаемая должность)	(инициалы, фамилия)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии «30» августа 2019 г.

Протокол № 1 Зав. кафедрой _____ / А.Ф. Шмидт /

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.