

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям
О.Г.Прохоренко

30 июня 2023 г.

Регистрационный № УД-14167/уч.



КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

**Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:**

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

направления специальности:

1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

1-31 05 01-02 Химия (научно-педагогическая деятельность)

2023 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 01-2021, учебных планов G-31-1-005/уч, G-31-1-006/уч, утвержденных 25.05.2021 и G31-1-231/уч. 22.03.2022 г, G31-1-232/уч. утвержденных 22.03.2022 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

А. Н. Рябцев, доцент кафедры органической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

Виталий Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

Ю.В.Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии химического факультета БГУ (протокол № 13 от 21.06.2023);

Научно-методическим советом БГУ (протокол № 9 от 29.06.2023)

Заведующий кафедрой

Д.В.Свиридов

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель первой части учебной дисциплины – дать студентам представление о квантово-механических подходах к теории химической связи, об основных методах расчета атомных и молекулярных систем, а также об основных областях применения квантовой химии. Задача этой части дисциплины – не только знакомство студентов с основами квантовой теории, математическим аппаратом квантовой механики, но и критическом понимании их реальных возможностей и ограничений. От студента требуется не только усвоение общих идей и принципов квантовой механики, но и их активное применение при решении задач.

Цель второй части учебной дисциплины – дать студентам представление о взаимосвязи между электронным строением, пространственной конфигурацией и другими свойствами молекул, а также заложить теоретическую основу спектроскопических методов изучения молекулярной структуры. Задача этой части дисциплины – не только знакомство студентов со спектроскопическими методами исследования молекул. Основное внимание обращается на зависимость свойств молекул от их электронного строения, на геометрические параметры молекул и симметрию, электрические и магнитные свойства, электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина относится к модулю «Строение и исследование вещества» компонента учреждения высшего образования.

Дисциплина «Квантовая химия и строение молекул» является одним из разделов физической химии, который включает в себя теоретические основы других разделов химии - неорганической, аналитической и органической и, вследствие этого, был выделен как самостоятельная дисциплина.

Дисциплина может быть прочитана после изучения дисциплины «Неорганическая химия».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Квантовая химия и строение молекул» должно обеспечить формирование следующих специализированных компетенций:

СК-7. Использовать понятийно-категориальный аппарат современной теории химического строения, включающих описание квантовых состояний молекул, симметрию молекулярных систем, строение конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов) для описания их электрических, магнитных и оптических свойств.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные постулаты квантовой механики;
- принципы квантово-механического описания многоэлектронных систем (атомов и молекул);
- природу химической связи и факторы, влияющие на ее прочность;

- характеристики, определяющие важнейшие электрические свойства молекул (дипольный момент и поляризуемость);
 - факторы, от которых зависит геометрическая конфигурация молекул;
 - основные положения современных теорий, описывающих строение координационных соединений
- о квантованных вращательных, колебательных и электронных состояниях молекул и их относительных энергиях как источниках информации о молекулярной структуре.

уметь:

- решать простейшие типовые задачи на базе соответствующих разделов курса;
- строить диаграммы орбитальных энергий для простейших молекул и условные изображения атомных и молекулярных орбиталей;
- делать заключения о наиболее важных свойствах молекул на основе их электронного строения (распределение электронной плотности, порядок и относительная прочность связей, ароматичность и т.п.);
- рассчитывать дипольный момент и поляризуемость простейших молекул на основании экспериментальных данных в рамках метода Дебая;
- предсказывать геометрическое расположение атомов в простых молекулах и определять их точечную симметрию;
- делать заключение о строении молекул на основе простых молекулярных спектров (колебательных, электронных, ядерного магнитного резонанса).

владеть:

- методологией расчета длины связей, валентных углов, энергий диссоциации для двухатомных молекул из вращательных и колебательных спектров;
- представлениями о современных методах расчета энергий и структурных параметров молекул.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 5 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Квантовая химия и строение молекул» отведено **для очной формы** получения высшего образования – 120 часов, в том числе 74 аудиторных часов. **Из них:**

лекции – 26 часов (из них 4 часа – с использованием дистанционных образовательных технологий), лабораторные занятия – 24 часа, семинарские занятия – 18 часов, управляемая самостоятельная работа (УСР) – 6 часов (из них 2 часа с использованием дистанционных образовательных технологий).

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Тема 1.1. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ОСНОВНЫЕ ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Основные постулаты квантовой механики. Волновые функции и их свойства. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.

Математический аппарат квантовой механики. Операторы физических величин и их свойства. Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Собственные функции и собственные значения. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Среднее значение физической величины.

Коммутационные соотношения операторов. Соотношения неопределенностей, физический смысл и простейшие оценки на их основе.

Уравнение Шредингера. Временное и стационарное уравнения Шредингера.

Тема 1.2. МОДЕЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и в трехмерном потенциальном ящике. Вырождение. Модель свободных электронов для сопряженных полиенов. Спектры сопряженных систем.

Гармонический осциллятор. Энергетические состояния и волновые функции.

Жесткий ротор. Энергетические состояния и волновые функции.

Тема 1.3. ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

Задача об атоме водорода. Разделение переменных. Атомные орбитали. Квантовые числа. Графическое представление радиальных и угловых частей. Функции радиального распределения. Энергетические состояния атома водорода.

Тема 1.4. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

Системы тождественных частиц. Одноэлектронное приближение. Спин элементарных частиц. Операторы спина, их коммутационные соотношения, собственные значения, собственные функции. Магнитный момент, связанный со спином. Антисимметричность волновой функции для системы электронов (принцип Паули). Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.

Теория момента импульса. Основные следствия коммутационных соотношений для компонент момента импульса. Сложение моментов для атомов.

Атом гелия. Синглетные и триплетные состояния.

Электронное строение и состояния многоэлектронных атомов. Спин-орбитальное взаимодействие. Термы состояний атомов по схеме Расселла-Саундерса.

Тема 1.5. ДВУХАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ

Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (LCAO). Вариационный метод Ритца. Понятия о кулоновском и резонансном интеграле и интеграле перекрывания. Задача о молекулярном ионе водорода. Электронное строение гомоядерных двухатомных молекул. Связывающие и разрывающие орбитали, σ - и π -орбитали.

Тема 1.6. РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Уравнение Шредингера для молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Полная энергия. Энергия нулевых колебаний (ZVPE). Стандартные базисные наборы гауссовских функций. STO-NG, K-LMG, базисные наборы с поляризационными и диффузными функциями. Уравнения Рутаана. Характеристика базисных наборов. Сравнительный анализ возможностей различных методов. Проблема выбора уровня теории при проведении квантохимического исследования.

Раздел 2. СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

Тема 2.1. МЕТОД МОЛКАО ДЛЯ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение ЛКАО для многоатомных молекул и необходимость учета их геометрического строения. Концепция отталкивания электронных пар валентной оболочки (ОЭПВО) и ее ограничения. Понятие о точечной симметрии молекул. Диаграммы орбитальных энергий для простейших многоатомных молекул. Канонические и локализованные орбитали. Гибридизация атомных орбиталей и валентные углы. Состояния многоатомных молекул.

Тема 2.2. МЕТОД ХЮККЕЛЯ ДЛЯ СОПРЯЖЕННЫХ СИСТЕМ

Приближения Хюккеля. Решение вековых уравнений и хюккелевский определитель. Линейные сопряженные полиены в методе Хюккеля. Аллильный радикал. Бутадиен. Циклические полиены. Бензол. Ароматичность и правило $4n + 2$. Порядки связей, π -электронные плотности и индексы свободной валентности.

Тема 2.3. Электрические свойства молекул

Электрический дипольный момент многоатомных молекул. Полярные и неполярные вещества. Дипольный момент и симметрия молекул. Парциальные дипольные моменты связей и структурных групп.

Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный дипольный момент и поляризуемость молекулы. Тензор поляризуемости.

Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками веществ: диэлектрической проницаемостью и показателем преломления. Уравнение Ланжевена-Дебая. Экспериментальное определение дипольных моментов и поляризуемости молекул. Молярная рефракция; уравнение Лорентца-Лоренца. Эмпирическая схема расчета молярных рефракций.

Раздел 3. Основы спектроскопических методов исследования молекулярной структуры

Спектроскопия как один из важнейших подходов к исследованию молекулярной структуры. Квантово-механическое описание взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Условия поглощения и правила отбора.

Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Относительные энергии и заселенности квантованных состояний.

Тема 3.1. ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ И ВАЩАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ

Вращательные состояния молекул. Вращение и вращательные состояния двухатомной молекулы как жесткого ротатора, а также с учетом центробежного растяжения. Вращательные спектры двухатомных молекул и информация, получаемая на их основе. Вращение и вращательные состояния многоатомных молекул. Вращательные состояния и спектр симметричного волчка. Определение межатомных расстояний и валентных углов из вращательных спектров.

Тема 3.2. КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ

Колебательные состояния молекул. Колебания двухатомных молекул в приближении гармонического осциллятора. Колебания ангармонического двухатомного осциллятора. Потенциал Морзе. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.

Колебания многоатомных молекул. Нормальные координаты и нормальные колебания. Классификация нормальных колебаний по симметрии. Правила отбора и симметрия колебаний.

Приближение групповых колебаний. Понятие о характеристических частотах. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния. Связь между колебательными спектрами и структурой молекул.

Тема 3.3. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ

Электронные состояния и электронные спектры молекул. Фотофизические процессы, происходящие при поглощении молекулами излучения УФ и видимой области (диаграмма Яблонского). Спектры люминесценции. Принцип Франка-

Кондона и колебательная структура полос в электронных спектрах. Типы электронных переходов в молекулах и способы их обозначения. Симметрия состояний и правила отбора в электронных спектрах поглощения. Структурные и сольватационные эффекты. Комплексы с переносом заряда. Связь электронных спектров поглощения со строением молекул.

Тема 3.4. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ И СПИН-РЕЗОНАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Магнитные свойства молекул. Магнитные моменты ядер и электронов. Состояния ядер и электронов в магнитном поле. Спиновые зеемановские уровни энергии. Условия наблюдения ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Явления релаксации. Химический сдвиг, его измерение и факторы, определяющие его величину. Значение химического сдвига для получения данных о структуре молекул. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ) и мультиплетная структура сигналов в спектрах ЯМР. Мультиплетность, константы ССВ. Спектры I порядка и спектры высших порядков. Связи между спектром и структурой молекул.

Условия наблюдения электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Взаимодействие электронных и ядерных спинов. Сверхтонкая структура в спектрах ЭПР.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий
(ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Квантовая химия							
1.1	Математический аппарат квантовой механики. Основные постулаты квантовой механики	2		2				собеседование
1.2	Модельные задачи квантовой механики	2		2	4			тест, контрольная работа
1.3	Водородоподобный атом	2			2		2 (ДОТ)	тест, контрольная работа
1.4	Многоэлектронные атомы	2 (ДОТ)		2	2			тест
1.5	Двухатомные молекулы	2 (ДОТ)		2	2			тест, контрольная работа
1.6	Расчетные методы квантовой химии	2		2	2			тест, контрольная работа
2	Строение молекул							
2.1	Метод МО ЛКАО для многоатомных молекул	2						собеседование
2.2	Метод Хюккеля для сопряженных систем	2			2		2	тест
2.3	Электрические свойства молекул	2		2	2			тест
3	Основы спектроскопических методов исследования молекулярной структуры							
3.1	Вращательные состояния молекул и вращательные спектры	2			2			тест
3.2	Колебательные состояния молекул и колебательные спектры	2		2	2		2	контрольная работа
3.3	Электронные состояния молекул и электронные спектры	2		2	2			тест

3.4	Магнитные свойства молекул и спин-резонансная спектроскопия	2		2	2			контрольная работа
	Итого	26		18	24		6	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. - Изд. 3-е, стер. - Санкт-Петербург ; Москва ; Краснодар : Лань, 2019. - 426 с.

Дополнительная литература

1. Волков, А.И. Метод молекулярных орбиталей : учеб. пособие / А. И. Волков. - Москва : Новое знание, 2006. - 133 с.
2. Краснов, К.С. Молекулы и химическая связь : [учеб. пособие для студ. химико-технол. спец. вузов] / К. С. Краснов. - Изд. 2-е, перераб. и доп. - Москва : Высшая школа, 1984. - 295 с.
3. Минкин, В.И. Теория строения молекул : Учеб. пособие для студ. вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов-на-Дону : Феникс, 1997. - 560 с.
4. Пентин, Ю.А., Основы молекулярной спектроскопии : учеб. пособие для студ. вузов, обуч по спец. 011000 - Химия и направлению 510500 - Химия / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - Москва : Бином. Лаборатория знаний : Мир, 2008. - 399 с.
5. Степанов, Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия : Учебник для студ. хим. фак. ун-тов / Н.Ф. Степанов. - М. : Изд-во Московского ун-та, 2001. - 519с.
6. Фларри, Р. Л. Квантовая химия : введение / Р. Фларри ; пер. с англ. Э. Д. Германа, Е. Л. Розенберга ; под ред. А. М. Бродского. - Москва : Мир, 1985. - 472 с.
7. Матулис, В. Э. Прикладная квантовая химия : учеб. пособие для студ. хим. и физ. спец. учрежд., обеспеч. получение высшего образования / Вадим Э. Матулис, Виталий Э. Матулис, О. А. Ивашкевич. - Минск : БГУ, 2007. - 144 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Для текущей оценки достижений и контроля качества усвоения знаний студентами используется следующий диагностический инструментарий: собеседование, тест, контрольная работа.

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Квантовая химия и строение молекул» учебным планом предусмотрен экзамен.

Для формирования итоговой отметки по учебной дисциплине используется модульно-рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей

обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущей и промежуточной аттестации студентов по учебной дисциплине.

Формирование итоговой отметки в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации (примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации):

- выполнение тестовых заданий – 50 %;
- письменные контрольные работы по отдельным темам – 50 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе итоговой отметки текущей аттестации (модульно-рейтинговой системы оценки знаний) 50 % и экзаменационной отметки 50 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 1.3: Водородоподобный атом (2 часа ДОТ)

Задание 1. Построить контурные карты АО.

Задание 2. Выполнить анализ распределения электронной плотности для различных электронных состояний водородоподобного атома.

Форма контроля – контрольная работа.

Тема 2.2: Метод Хюккеля для сопряженных систем (2 часа)

Задание: По результатам расчетов орбитальных энергий и коэффициентов в рамках метода МО ЛКАО Хюккеля определить структурные индексы для молекул пиррола, пиридина и акролеина.

Форма контроля – тест.

Тема 3.2: Колебательные состояния молекул и колебательные спектры (2 часа)

Задание 1. По данным колебательного спектра определить энергию диссоциации заданной двухатомной молекулы.

Задание 2. Определить точечную группу, к которой принадлежит заданная многоатомная молекула, и установить число и симметрию нормальных колебаний, которые проявляются в инфракрасном (ИК)спектре этой молекулы.

Задание 3. Выбрать из ряда предложенных структур ту, которая соответствует заданному ИК-спектру.

Форма контроля – контрольная работа.

Примерный перечень семинарских и лабораторных занятий

1. Операторы физических величин и их свойства. Нахождение собственных значений операторов.

2. Частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

3. Спектры сопряженных систем.

4. Колебательные уровни двухатомных молекул.

5. Вращательные уровни двухатомных молекул.
6. Атомные орбитали. Квантовые числа.
7. Графическое представление радиальных и угловых частей.
8. Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.
9. Термы состояний атомов по схеме Расселла-Саундерса.
10. Задача о молекулярном ионе водорода.
11. Электронное строение гомоядерных двухатомных молекул.
12. Стандартные базисные наборы гауссовых функций.
13. Сравнительный анализ возможностей различных методов.
14. Построение диаграмм орбитальных энергий для многоатомных молекул.
15. Пространственное строение и симметрия молекул.
16. Термы состояний многоатомных молекул.
17. Метод МО ЛКАО Хюккеля для ациклических и циклических систем.
18. Согласованные реакции.
19. Определение дипольных моментов и поляризуемости молекул с помощью методов Дебая и Гуттнгейма.
20. Определение межъядерных расстояний и валентных углов по данным из вращательных спектров для простых молекул типа симметричного ротора.
21. Определение силовых постоянных и энергий диссоциации двухатомных молекул по данным из колебательных спектров.
22. Анализ инфракрасных спектров молекул в рамках приближения групповых колебаний.
23. Электронное строение и электронный спектр поглощения молекулы бензола.
24. Структурные и сольватационные эффекты в электронной спектроскопии поглощения.
25. Спектроскопия протонного магнитного резонанса (ПМР). Химический сдвиг и его связь со структурой молекул.
26. Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ПМР и его связь со структурой молекул.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются **эвристический и практико-ориентированный подходы**, которые предполагают:

- демонстрацию многообразия решений профессиональных задач;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности;
- освоение содержания образования через решения практических задач.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;

выполнение домашнего задания;

решение задач, предлагаемых на практических занятиях;

подготовка к практическим семинарским занятиям;

научно-исследовательские работы;

составление моделей и проведение расчетов.

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. Приближение независимых частиц. Волновые функции многоэлектронных систем. Принцип Паули. Определители Слейтера.

2. Основы метода МО ЛКАО. Вариационный метод Ритца. Вековые уравнения. Связывающие и разрывающие молекулярные орбитали.

3. Факторы, определяющие геометрическое строение молекул. Концепция отталкивания электронных пар валентной оболочки (ОЭПВО)..

4. Точечная симметрия молекул. Элементы и операции точечной симметрии. Точечные группы. Таблицы характеров. Неприводимые и полные представления.

5. Электронное строение многоатомных молекул в простом методе МО ЛКАО. Принципы построения диаграмм орбитальных энергий.

6. Понятие гибридизации АО и его применение. Гибридные АО и направление химических связей.

7. Канонические и локализованные МО. Симметрия канонических МО.

8. Простой метод МОХ для ациклических сопряженных полиенов.

9. Простой метод МОХ для циклических сопряженных полиенов. Понятие ароматичности.

10. Структурные индексы в методе МОХ. Учет гетероатома в методе МОХ.

11. Термы электронных состояний молекул.

12. Электрические свойства молекул: дипольный момент и поляризуемость. Дипольный момент и симметрия молекул.

13. Экспериментальное определение дипольных моментов и поляризуемости молекул. Уравнение Ланжевена-Дебая.

14. Мольная рефракция и ее применение. Уравнение Лорентца-Лоренца.

15. Вращение и вращательные спектры двухатомных молекул.

16. Вращение и вращательные спектры многоатомных молекул.

17. Колебания и колебательные спектры двухатомных молекул.

18. Колебания и колебательные спектры многоатомных молекул.

Нормальные координаты и нормальные колебания.

19. Симметрия нормальных колебаний молекул и правила отбора для инфракрасных спектров.

20. Спектроскопия комбинационного рассеяния. Правило альтернативного запрета.

21. Приближение групповых колебаний и его ограничения. Применение ИК-спектроскопии для установления молекулярной структуры.
22. Электронные состояния молекул и электронные спектры. Типы хромофоров и их связь со спектрами поглощения. Ауксохромы и их влияние на спектры.
23. Принцип Франка-Кондона и колебательная структура полос поглощения в электронных спектрах.
24. Правила отбора в электронной спектроскопии поглощения. Применение симметрии в правилах отбора.
25. Электронное строение и электронный спектр молекулы бензола.
26. Структурные эффекты в электронной спектроскопии поглощения. Правила Вудворда-Физера и Скотта.
27. Стерические и сольватационные эффекты в электронной спектроскопии поглощения
28. Магнитные моменты ядер. Изменение энергии ядерных спиновых состояний под действием внешнего магнитного поля. Относительная заселенность ядерных спиновых состояний в присутствии магнитного поля.
29. Условия наблюдения ядерного магнитного резонанса. Процессы релаксации и их влияние на вид спектра.
30. Понятие химической эквивалентности ядер. Химический сдвиг в ПМР и факторы, влияющие на его величину. Измерение химического сдвига.
31. Спин-спиновое взаимодействие в ПМР. Спиновые системы. Условие получения спектров ПМР I порядка.
32. Правила интерпретации мультиплетов I порядка в спектрах ПМР. Понятие о мультиплетах высших порядков.
33. Применение метода ПМР для определения молекулярной структуры.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Учебная дисциплина не требует согласования			

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на 2024 / 2025 учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание
1.	<p>Добавить задание в примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы</p> <p>Тема 1.3: Водородоподобный атом</p> <p>Задание 3. Построить изоэлектронные поверхности АО.</p>	Обновление содержания учебной программы

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
неорганической химии (протокол № 11 от 31.05.2024 г.)

• Заведующий кафедрой



Д.В.Свиридов

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета



А.В.Зураев