

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

(подпись) А.Л. Толстик

(дата утверждения)

Регистрационный № УД-_____/р.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

(название дисциплины)

Учебная программа 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)
(код специальности) (наименование специальности)

Химический факультет

(название факультета)

Кафедра органической химии

Курс (курсы) 3

Семестр (семестры) 7

Лекции 36
(количество часов)

Экзамен 7
(семестр)

Практические (семинарские)
занятия 6
(количество часов)

Зачет -

Лабораторные
занятия 18
(количество часов)

Курсовой проект (работа) -

КСР 8
(количество часов)

Всего аудиторных часов по дисциплине 68
(количество часов)

Всего часов

по дисциплине _____
(количество часов)

Форма получения высшего
образования очная

Составил А.Н. Рябцев, к.х.н., доцент
(И.О.Фамилия, степень, звание)

Минск 2013 г.

Учебная рабочая программа составлена на основе базовой учебной программы «Квантовая химия и строение молекул».

Дата утверждения _____ Регистрационный номер _____

Рассмотрена и рекомендована к утверждению на заседании кафедры органической химии

Дата _____ Номер протокола _____

Заведующий кафедрой

_____ Ю.Ю. Козырьков
(подпись)

Одобрена и рекомендована к утверждению Учебно-методической (методической) комиссией химического факультета

(дата, номер протокола)

Председатель

_____ Е.И. Василевская
(подпись) (И.О.Фамилия)

Пояснительная записка

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

В этом курсе можно условно выделить две родственные и тесно связанные между собой части, которые читаются в течение двух последовательных семестров.

В первой части этого лекционного курса, в котором рассматриваются главным образом вопросы квантовой химии, студенты знакомятся с основами квантовой теории, математическим аппаратом квантовой механики, решениями простейших квантово-механических задач. Цель этой части курса – дать студенту 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.

Эта рабочая программа описывает содержание второй части настоящего курса, в которой рассматриваются преимущественно вопросы строения молекул. При этом 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. Цель этой части курса – дать студенту представление о взаимосвязи между электронным строением, пространственной конфигурацией и другими свойствами молекул, включая реакционную способность, а также заложить теоретическую основу спектроскопических методов изучения молекулярной структуры. Студент должен *знать* 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, а также иметь четкое представление о квантованных вращательных, колебательных и электронных состояниях молекул и их относительных энергиях как источниках информации о молекулярной структуре. Студент должен *уметь* 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, рассчитывать длины связей, валентные углы, энергии диссоциации и квазиупругие постоянные двухатомных молекул из вращательных и колебательных спектров, делать заключения о строении молекул на основе простых молекулярных спектров (колебательных, электронных, ядерного магнитного резонанса).

Учебный план предусматривает для второй части данной дисциплины 134 часа, из которых 68 часов приходится на аудиторные занятия. Аудиторные занятия, в свою очередь, делятся на лекционные (36 часов), семинарские/практические/КСР (14 часов) и лабораторные занятия (18 часов). В процессе семинарских занятий прорабатываются наиболее трудные разделы читаемого курса, на практических занятиях студенты под руководством преподавателя решают задачи по соответствующим разделам курса, а на лабораторных занятиях студенты производят обработку экспериментальных результатов (выполняют необходимые расчеты, обрабатывают и интерпретируют спектры и т.д.). Контроль самостоятельной работы студентов может осуществляться в виде контрольных работ, проводимых в рамках практических занятий, а также проверки домашних заданий, которые студенты получают после каждого практического/лабораторного занятия.

Содержание учебного материала

№п/п	Наименование разделов, тем	Количество часов*				
		Аудиторные				Самост. работа
		Лекции	Практич., семинар.	Лаб. занят.	КСР	
1.	Состояния многоэлектронных атомов и атомные спектры.	2	-	2	1	4
2.	Геометрическое строение молекул	2	-	2	1	6
3.	Симметрия молекул и молекулярных орбиталей	4	2	-	1	6
4.	Строение координационных соединений	4	2	-	1	6
5.	Электрические свойства молекул	4	-	2	1	4
6.	Принцип сохранения орбитальной симметрии и реакционная способность молекул	4	-	2	1	6
7.	Введение в молекулярную спектроскопию	2	-	-	-	6
8.	Вращательные состояния молекул и вращательные спектры	2	-	2		4
9.	Колебательные состояния молекул и колебательные спектры	4	-	3	1	8
10.	Электронные состояния молекул и электронные спектры	4	1	2	1	8
11.	Магнитные свойства молекул и спин-резонансная спектроскопия	4	1	3		8
	Итого	36	6	18	8	66

* Высшие учебные заведения имеют право перераспределять аудиторные часы между разделами и темами типовой учебной программы

Учебно-методическая карта

Номер раздела, темы, занятия	Название раздела, темы, занятия; перечень изучаемых вопросов	Количество аудиторных часов				Материальное обеспечение занятия (наглядные, методические пособия и др.)	Литература	Формы контроля знаний
		лекции	практические (семинарские) занятия	лабораторные занятия	контролируемая самостоятельная работа студента			
1.	Состояния многоэлектронных атомов и атомные спектры. Электронное строение и состояния многоэлектронных атомов. Спин-орбитальное взаимодействие. Термы состояний атомов по схеме Расселла-Саундерса. Спектры атомов щелочных и щелочноземельных элементов. Нормальный и аномальный эффекты Зеемана в атомной спектроскопии. Эффект Пашена-Бака.	2	-	2	1	Таблицы основных физических констант	1, 8, 13	Проверка правильности решения задач. Выполнение домашнего задания
2.	Геометрическое строение молекул Основы качественной теории МОЛКАО. Канонические и локализованные молекулярные орбитали. Концепция ОЭПВО. Гибридизация. Термы состояний многоатомных молекул.	2	-	2	1		3, 6, 8, 13	Проверка правильности решения задач. Выполнение домашнего задания
3.	Симметрия молекул и молекулярных орбиталей Применение понятий теории точечной симметрии для описания электронного строения многоатомных молекул. Точечные группы. Неприводимые и полные представления. Таблицы характеров.	4	2	-	1	Таблицы характеров	8, 13	Проверка правильности решения задач. Выполнение домашнего задания
4.	Строение координационных соединений Описание строения комплексных соединений с помощью теории кристаллического поля (ТКП). Энергия стабилизации кристаллическим полем (ЭСКП). Термы состояний комплексов. Спектральные и магнитные свойства комплексов. Эффект Яна-Теллера. Теория поля лигандов (ТПЛ). π -Связи в комплексных соединениях. Правило 18 электронов.	4	2	-	1	Экспериментальные данные для ряда комплексов. Таблицы характеров	6, 8, 13	Проверка правильности решения задач. Выполнение домашнего задания
5.	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	4	-	2	1	Экспериментальные данные для выполнения расчетов. Таблицы атомных	2, 4, 13	Проверка правильности решения задач. Выполнение домашнего задания

	– с макроскопическими характеристиками веществ: диэлектрической проницаемостью и показателем преломления. Уравнение Ланжевена-Дебая. Уравнение Клаузиуса-Мосотти. Молярная рефракция; уравнение Лорентца-Лоренца. Эмпирическая схема расчета молярных рефракций					рефракций и рефракций связей.		
6.	Принцип сохранения орбитальной симметрии и реакционная способность молекул Квантово-химическое описание механизмов химических реакций. Теория граничных орбиталей Фукуи. Качественный анализ возможных механизмов химических реакций на основе орбитальных представлений. Согласованные реакции. Симметрия реагентов и продуктов реакций. Сохранение орбитальной симметрии и корреляционные правила Вудворда-Гофмана для перициклических реакций.	4	-	2	1		8	Выполнение домашнего задания. Контрольная работа по пройденному материалу.
7.	Введение в молекулярную спектроскопию Спектроскопия как один из важнейших подходов к исследованию молекулярной структуры. Квантовомеханическое 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.	2	-	-	-		1, 2, 4, 13	-.
8.	Вращательные состояния молекул и вращательные 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.	2	-	2		Вращательные спектры простых молекул. Экспериментальные данные для выполнения расчетов.	1, 2, 13	Проверка правильности решения задач.
9.	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. Приближение групповых колебаний, его обоснование и ограничения. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния. Правила отбора и симметрия колебаний. Структурная информация, получаемая из колебательных спектров.	4	-	3	1	Справочные таблицы характеристических групповых частот колебаний. ИК-спектры. Таблицы характеров.	1, 2, 5, 13	Проверка правильности решения задач.
10.	Электронные состояния молекул и электронные спектры Электронные состояния и электронные спектры молекул. Фотофизические процессы, происходящие при поглощении молекулами излучения УФ и видимой области. Принцип Франка-Кондона и колебательная структура полос в электронных спектрах. Классификация электронных переходов. Связь электронных спектров поглощения со строением молекул. Структурные и сольватационные эффекты. Комплексы с переносом заряда. Информация, получаемая из электронных спектров	4	1	2	1	Справочные таблицы для выполнения расчетов. Таблицы характеров. УФ-спектры.	1, 2, 5, 13	Проверка правильности решения задач.

11.	Магнитные свойства молекул и спин-резонансная спектроскопия Магнитные свойства молекул. Магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость вещества. Диамагнитные и парамагнитные вещества. 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 тонкая структура спектров ЯМР. Мультиплетность, константы ССВ. Спектры первого порядка и высших порядков. Интерпретация спектров протонного магнитного резонанса. Условия наблюдения электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Взаимодействие электронных и ядерных спинов. Сверхтонкая структура в спектрах ЭПР. Структурная информация, получаемая из спектров ЭПР.	4	1	3		Справочные таблицы химических сдвигов и констант ССВ. Спектры ПМР органических соединений . Спектры ЭПР свободных радикалов.	1. 2, 5, 13	Проверка правильности решения задач. Контрольная работа по пройденному материалу
		36	6	18	8			

Информационная часть

ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. М.: Мир, 1985.
2. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, 2003.
3. Гиллеспи Р., Харгиттаи И.. Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки и строение молекул. М.: Мир, 1992.
4. Заградник Р., Полак Р.. Квантовая химия. М.: Мир, 1979.
5. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии в органической химии (задачник). М.: МГУ, 1977.
6. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. М.: Высшая школа, 1984.
7. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. М.: Мир, 1980.
8. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высшая школа, 1979.
9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997.
10. Симкин Б.Я, Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н.. Задачи по теории строения молекул. Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997.
11. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.
12. Фларри Р. Квантовая Химия. М.: Мир, 1985.
13. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы, твердое тело. Бином, М. 2010.
14. Эткинс П. Физическая химия, т. 1,2. М.: Мир, 1982.
15. Atkins P.W., Friedman R.S. Solutions Manual for Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1997.

Дополнительная

1. Ю. Беккер. Мир Химии: Спектроскопия.. Техносфера, М. 2009.
2. Волков А.И. Метод молекулярных орбиталей. М.: Новое знание, 2006.
3. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. М.: Мир, 1999.
4. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1,2. М.: Мир, 1981.
5. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1972.
6. М.А. Ельяшевич. Общие вопросы спектроскопии. Комкнига, М..2007.
7. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений (задачник). М.: Высшая школа, 1984.
8. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. М.: Химия, 1986.
10. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. М.: Мир, Бином, 2008.
11. Татевский В.М. Строение молекул. М.: Химия, 1977.
12. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.

**ПРОТОКОЛ
СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ
ДИСЦИПЛИНЕ С ДРУГИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ СПЕЦИАЛЬНОСТИ**

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)*

* При наличии предложений об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ
К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ НА
_____ / _____ УЧЕБНЫЙ ГОД**

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
органической химии (протокол № _____ от _____ 20__ г.)

Заведующий кафедрой

Ю.Ю. Козырьков, кандидат химических наук, доцент
(И.О.фамилия, степень, звание) (подпись)

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета

Д.В. Свиридов, доктор химических наук, профессор
(И.О.фамилия, степень, звание) (подпись)
