

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Строение молекул**

Курс предназначен для студентов 4 курса специалитета химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Цель курса: изучить основные приближения, используемые при определении ядерных состояний молекулярных систем и вероятностей спектральных переходов.

Основные задачи: выработать понимание условий применимости различных приближений при описании электронно-колебательно-вращательных состояний молекул и оценке вероятностей электронных, колебательных и вращательных переходов молекул с поглощением и рассеянием излучения, а также состояний молекул в магнитных полях и магнитно-резонансных методов изучения особенностей их ядерного строения и распределения электронной плотности.

Решение соответствующих задач дает информацию о возможных микросостояниях молекулярных частиц как основу для статистико-термодинамической оценки функций состояния их ансамблей, а также о механизмах их химических превращений, в том числе при воздействии электромагнитного излучения, и характеризующих их изменениях термодинамических функций состояния.

2. Уровень высшего образования – **специалитет**

3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП. Дисциплина читается в 7 семестре.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
Компетенция	Знания, умения, владения
С-ОНК-1: обладание знаниями о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук: физики, химии, биологии, наук о земле и человеке, экологии; владение основами методологии научного познания различных уровней организации материи, пространства и времени; умение, используя междисциплинарные системные связи наук, самостоятельно выделять и решать основные мировоззренческие и методологические естественнонаучные и социальные проблемы с целью планирования устойчивого развития	Код 31 (С-ОНК-1) ЗНАТЬ: предмет и объекты изучения, методы исследования, современные концепции, достижения и ограничения естественнонаучных дисциплин Код В1 (С-ОНК-1) ВЛАДЕТЬ: методологией научного познания различных уровней организации материи, пространства и времени
С-ОНК-4: владение методологией научных исследований в профессиональной области	Код 32 (С-ОНК-4) ЗНАТЬ: теоретические основы химических дисциплин, необходимые для проведения научных исследований в сфере профессиональной деятельности
С-ОНК-5: способность создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные математические результаты, владение знаниями об ограничениях и границах применимости моделей; способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики	Код 31 (С-ОНК-5) ЗНАТЬ: математические и физические модели, используемые при решении типовых химических задач Код 32 (С-ОНК-5) ЗНАТЬ: ограничения и границы применимости физических и математических моделей в химии Код У1(С-ОНК-5) УМЕТЬ: интерпретировать результаты физико-математического моделирования свойств химических объектов Код В1 (С-ОНК-5) ВЛАДЕТЬ: навыками физико-математического моделирования свойств химических объектов и процессов с их участием Код: В2 (С-ОНК-5) ВЛАДЕТЬ: навыками использования базовых физических знаний при решении химических задач
С-ОНК-6: владение фундаментальными разделами математики, необходимыми для решения научно-исследовательских и практических задач в профессиональной области	Код У1(С-ОНК-6) УМЕТЬ: применять полученные знания фундаментальных разделов математики для анализа основных задач, типичных для естественнонаучных дисциплин Код: В2 (С-ОНК-6) ВЛАДЕТЬ: приемами решения основных задач, типичных для естественнонаучных дисциплин, на основе знаний фундаментальных

	разделов математики
С-ПК-1: знание основных этапов и закономерностей развития химической науки, обладание представлениями о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков	32 (СПК-1) ЗНАТЬ: формы и методы научного познания применительно к химии В2 (СПК-1) ВЛАДЕТЬ: формами и методами научного познания применительно к химии
С-ПК-3: понимание принципов работы и умение работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований	31 (СПК-3) ЗНАТЬ: теоретические основы физических методов изучения состава и свойств веществ и материалов 32 (СПК-3) ЗНАТЬ: возможности и ограничения применения физических методов исследования химических объектов
С-ПК-4: знание основ теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, коллоидной химии, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии)	35 (СПК-4) ЗНАТЬ: основные приближения квантовой химии и принципы методов, используемых при расчетах электронной структуры, строения и реакционной способности химических соединений; понимать возможности использования расчетных результатов квантовой механики в статистической термодинамике, теории элементарного акта химических превращений, молекулярной спектроскопии и других разделах современной химии У1(СПК-4) УМЕТЬ: использовать теоретические модели для обоснования строения и реакционной способности веществ различной природы, планирования синтетических работ У2 (СПК-4) УМЕТЬ: применять теоретические знания из различных областей химической науки при решении учебных и научных задач химической направленности У3 (СПК-4) УМЕТЬ: использовать теоретические знания для анализа и объяснения полученных экспериментальных результатов в выбранной области химии В1 (СПК-4) ВЛАДЕТЬ: навыками применения теоретических основ традиционных и новых разделов химии при решении учебных и научных задач химической направленности
С-ПК-5: умение применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	У1(СПК-5) УМЕТЬ: применять основные законы химии для интерпретации полученных результатов, объяснения химических явлений в живой и неживой природе У2(СПК-5) УМЕТЬ: пользоваться информационными базами данных для

	решения задач профессиональной деятельности
С-ПК-6: владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	В2 (СПК-6) ВЛАДЕТЬ: методологией исследования состава и свойств веществ и материалов (неорганических, органических, полимерных, композитных, синтетических аналогов природных объектов и др.) на основе полученных фундаментальных теоретических знаний и приобретенных экспериментальных навыков

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетные единицы, всего 144 часа, из которых 80 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов занятия семинарского типа, 4 часа групповых консультаций, 4 часа мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 64 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете должны быть освоены общие курсы «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Теория вероятностей», «Дифференциальные уравнения», «Уравнения математической физики», «Теоретическая механика», «Механика. Электричество», «Колебания и волны. Оптика», «Квантовая механика», «Квантовая химия».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация	Всего	Выполнение домашних заданий	Работа с оригинальной литературой, подготовка	Всего
Тема 1	5	2	2				4	1		1
Тема 2	5	2	2				4	1		1
Тема 3	8	4	2				6	2		2
Тема 4	6	2	2				4	2		2
Тема 5	6	2	2				4	2		2
Тема 6	6	2	2				4	2		2
Тема 7	8	2	2	2			6	2		2

Тема 8	7	2	2			2	6	1		1
Тема 9	6	2	3				5	1		1
Тема 10	7	2	3				5	2		2
Тема 11	8	4	2				6	2		2
Тема 12	6	2	2				4	2		2
Тема 13	6	2	2				4	2		2
Тема 14	8	2	2	2			6	2		2
Тема 15	7	2	3				5	2		2
Тема 16	9	2	3			2	7	2		2
Промежуточная аттестации: экзамен	36									36
Итого	144	36	36	4		4	80	28		64

Содержание тем:

Тема 1. Молекулярная задача в квантовой механике. Стационарное уравнение Шредингера для систем, состоящих из ядер и электронов. Электронный оператор Гамильтона и электронное уравнение. Ядерная задача в адиабатическом приближении. Адиабатический потенциал и теорема Гельмана-Фейнмана. Классическая динамика ядер.

Тема 2. Анализ ядерных движений молекулярной системы. Переход к переменным, включающим декартовы координаты центра масс, углы Эйлера и внутренние естественные переменные. Главные оси инерции. Условия Экарта как условия разделения поступательного движения молекулы в пространстве, ее вращения как недеформируемого целого и возвратно-поступательных (колебательных) движений ядер относительно центра масс молекулы. Малые амплитуды колебаний ядер как условие отсутствия дополнительного импульса поступательного движения молекулы и момента ее вращательного движения при колебательных искажениях ядерной конфигурации.

Тема 3. Анализ вращательной динамики молекулярной системы. Вращательная функция Гамильтона. Оператор квадрата момента импульса и операторы его проекций в лабораторной и молекулярной системах координат. Безразмерный оператор момента импульса

и вращательные постоянные. Набор коммутирующих операторов, характеризующих вращательные состояния различных молекулярных волчков. Общий вид решения вращательной задачи в случае сферических и симметричных волчков.

Тема 4. Колебания молекул. Использование независимых внутренних переменных и сопряженных им импульсов. Разложение адиабатического потенциала в ряд. Квадратичная аппроксимация потенциала. Нормальные координаты. Модель колеблющейся молекулы как совокупности не взаимодействующих гармонических осцилляторов. Энергии и функции колебательных состояний молекул в этом приближении.

Тема 5. Ангармонизм и взаимодействие колебаний. Выход за рамки гармонической модели при описании колебательных состояний молекул. Учет членов более высокого порядка при аналитической аппроксимации адиабатического потенциала. Применение теории возмущений для уточнения решений базовой колебательной задачи. Представление энергии колебательных состояний молекул в виде ряда по степеням $(v_i + \frac{1}{2})$. Вариационный способ уточнения решений в случае близко расположенных колебательных уровней одинаковой симметрии. Резонансы.

Тема 6. Движения большой амплитуды в молекулах. Понятие опорной конфигурации. Внутреннее вращение. Аппроксимация сечения поверхности потенциальной энергии вдоль координаты внутреннего вращения. Условия отделения внутреннего вращения от вращения молекулы как целого в пространстве и от ее колебаний. Анализ задачи об относительном вращении двух функциональных групп. Почти свободное и заторможенное вращение. Крутильные колебания.

Тема 7. Электронно-колебательное взаимодействие. Учет малых смещений ядер при анализе электронной задачи в рамках теории возмущений; соответствующая модификация электронного гамильтониана и оценка поправок к электронной энергии. Устойчивость симметричных конфигураций ядерной системы в невырожденных электронных состояниях и их неустойчивость в вырожденных электронных состояниях. Эффект Яна-Теллера.

Тема 8. Обобщение особенностей и методов решения ядерной задачи. Введение условий Эккарта-Сейвеца и выделение движений малой амплитуды и внутренних вращений. Зависимость получаемых решений от характера поверхности потенциальной энергии, изотопного состава молекулы и особенностей распределения электронной плотности. Учет колебательно-вращательного взаимодействия в рамках теории возмущений и аппроксимация вращательных постоянных молекул в различных колебательных состояниях.

Тема 9. Молекула во внешнем электромагнитном поле. Временное уравнение Шредингера. Разложение возмущенной полем молекулярной функции по базису стационарных состояний. Применение временной теории возмущений при незначительной длительности и интенсивности внешнего воздействия. Физическая природа процессов, вероятности которых могут быть определены в первом и втором порядках теории возмущений. Полуклассическая теория взаимодействия молекул с излучением.

Тема 10. Процессы поглощения и испускания излучения. Описание в рамках первого порядка теории возмущений. Выделение доминирующих вкладов в оператор возмущения. Спектральные диапазоны, отвечающие переходам с изменением вращательных,

колебательных и электронных состояний молекулярных систем. Выделение вкладов, определяющих преимущественно вероятность поглощения и испускания излучения молекулой при воздействии на нее электромагнитной волны. Оценка вероятности процесса поглощения в дипольном приближении.

Тема 11. Правила отбора в спектрах поглощения. Приближенный характер правил отбора. Факторизация молекулярной функции состояния при использовании адиабатического приближения и условий Экарта. Электронные переходы: принцип Франка-Кондона, общие правила отбора, факторы Франка-Кондона. Колебательные переходы: разложение оператора дипольного момента в ряд по нормальным координатам, общие правила отбора. Вращательные переходы: общие правила отбора.

Тема 12. Колебательно-вращательные спектры поглощения многоатомных молекул. Общее выражение для матричного элемента проекции дипольного момента перехода с учетом квадратичных членов разложения дипольного момента в ряд по отклонениям ядер от равновесных положений. Анализ правил отбора в рамках модели нормальных колебаний. Фундаментальные переходы; обертоны и составные линии в спектре. Вращательные контуры колебательных полос молекул различного типа.

Тема 13. Взаимодействие молекул с электромагнитным полем: эффекты, квадратичные по напряженности приложенного поля. Статическая поляризуемость молекул. Переходы молекул в поле излучения: процессы второго порядка. Основные приближения и интерпретация выражений, получаемых во втором порядке временной теории возмущений. Рассеяние излучения: релеево и комбинационное. Вероятность спектрального перехода с рассеянием излучения как функция матричных элементов оператора поляризуемости и интенсивности излучения.

Тема 14. Спектры рассеяния. Приближенные правила отбора, основанные на разделении переменных. Электронные спектры рассеяния. Колебательные спектры комбинационного рассеяния молекул с различными равновесными конфигурациями. Тензоры поляризуемости и вращательные спектры рассеяния различных молекулярных волчков.

Тема 15. Состояния молекул в магнитных полях. Линейный отклик молекулы на постоянное магнитное поле. Магнитный дипольный момент и его орбитальная и спиновая компоненты. Магнетон Бора и ядерный магнетон; g -фактор; константа экранирования. Эффект Зеемана. Спин-спиновые взаимодействия частиц: константы спин-спинового и сверхтонкого взаимодействий.

Тема 16. Теоретические основы магнитно-резонансных методов. Модельные гамильтонианы, используемые для описания состояния дублетных и синглетных частиц, включающих ядра с ненулевым спином. Энергии состояний указанных частиц при учете спин-спиновых взаимодействий в рамках теории возмущений. Электронный парамагнитный резонанс и ядерный магнитный резонанс: принцип организации эксперимента и правила отбора в спектрах. Энергии переходов и структура (мультиплетность) спектральных сигналов.

Темы семинарских занятий:

1. Совокупность собственных значений электронного гамильтониана как функция независимых (3К-6) переменных, задающих ядерную конфигурацию. Поверхность потенциальной энергии и способы выбора независимых внутренних координат молекулярной системы. Переход к лабораторной и молекулярной системам координат. Углы Эйлера. Выделение кинетической энергии поступательного движения, энергии вращения молекулы и энергии возвратно-поступательных движений ядер относительно центра масс системы.
2. Вращение молекулярной системы. Классическая энергия вращения. Молекулярные волчки. Классификация волчков соответственно соотношению главных моментов инерции (сферические, симметричные и асимметричные). Расчет моментов инерции ряда простых малоатомных молекул. Учет симметрии ядерной конфигурации при определении типов молекулярных волчков.
3. Спектры вращательных состояний различных молекулярных волчков. Примеры сферических и симметричных вытянутых и сплюснутых молекулярных волчков. Вариационный подход к решению квантовой задачи о состояниях асимметричного молекулярного волчка. Примеры асимметричных волчков и фрагментов их спектров энергетических состояний. Корреляционная диаграмма состояний асимметричного и симметричных волчков, различающихся значением одной вращательной постоянной.
4. Симметрия ядерных движений. Преобразование координат ядер при различных операциях симметрии и построение 3К-мерного представления. Поступательное и вращательное представления нелинейных многоатомных молекул. Колебательное представление, его разложение по неприводимым представлениям точечной группы симметрии молекулы и определение числа колебаний каждого типа симметрии.
5. Формы и взаимодействие колебаний. Построение симметризованных внутренних координат и приближенное определение форм нормальных колебаний молекул, имеющих симметричную равновесную конфигурацию. Невырожденные и вырожденные колебания. Особенности энергетических спектров изотопомеров. Взаимодействие колебаний на примере трехатомных молекул: уточнение энергии в первом порядке теории возмущений.
6. Внутреннее вращение. Примеры сечений поверхностей потенциальной энергии вдоль координаты (угла) вращения в случае наличия функциональных групп различной локальной симметрии. Решение вариационной задачи о состояниях молекулярной системы, имеющей одну степень свободы внутреннего вращения. Сравнение результатов со случаями свободного вращения и крутильных колебаний.
7. Иллюстрация эффекта Яна-Теллера на примере молекулярных систем, имеющих в основном электронном состоянии равновесную конфигурацию типа правильной пирамиды. Анализ уравнений, определяющих поправки к энергии в первом порядке теории возмущений в случае вырожденных состояний. Определение ян-теллеровых мод и симметрии возникающей при их учете искаженной ядерной конфигурации. Полное или частичное снятие вырождения электронного состояния.

8. Общая концепция описания ядерных состояний молекулярных систем: применимость различных приближений; выделение независимых задач; решение задач с использованием теории возмущений и вариационного подхода; анализ решений; учет взаимодействий различных типов движений и неадиабатических эффектов в рамках теории возмущений.
9. Основы классической электродинамики. Уравнения Максвелла. Векторный и скалярный потенциалы и их связь с электрической и магнитной индукцией и напряженностью. Калибровочные функции. Калибровка Лоренца. Волновые уравнения, определяющие векторный и скалярный потенциалы. Электромагнитные волны и калибровка Кулона. Плоские монохроматические волны. Вектор Пойнтинга, интенсивность и плотность излучения.
10. Феноменологическая модель Эйнштейна, применяемая для описания равновесного состояния системы «молекула в поле излучения». Использование модели абсолютно черного тела и распределения Больцмана. Коэффициенты Эйнштейна, характеризующие вероятности спонтанного и индуцированного излучением процессов. Вывод соотношений между коэффициентами Эйнштейна. Времена жизни молекул в возбужденных состояниях.
11. Спектры поглощения двухатомных молекул. Функции состояния молекул в приближении «жесткий ротатор-гармонический осциллятор». Общие правила отбора. Вращательный спектр: правила отбора по J и M (полному моменту и его проекции на ось молекулы). Колебательный спектр: общие правила отбора; вращательная структура полосы; учет колебательно-вращательного взаимодействия при интерпретации спектральных данных.
12. Совместный анализ нескольких колебательных спектральных переходов двухатомных молекул: определение гармонической частоты колебаний и ангармонической поправки; восстановление потенциальной кривой молекулы в предположении применимости модели Морзе. Влияние изотопного замещения на вращательную структуру и положение спектральной полосы: расстояния между линиями P и R ветвей полосы. Определение молекулярных постоянных.
13. Вращательные спектры и вращательные контуры колебательных полос многоатомных молекул. Вращательные функции состояния различных молекулярных волчков как функции углов Эйлера. Правила отбора по J , определяющие вращательные переходы молекул в дипольном приближении. Колебательно-вращательные спектры поглощения различных многоатомных молекулярных волчков: P , Q и R ветви; параллельные и перпендикулярные полосы.
14. Совместный анализ колебательных спектров поглощения и комбинационного рассеяния молекул, нацеленный на определение структуры. Сравнение спектров молекул одинакового состава с различными равновесными конфигурациями. Сопоставление спектров поглощения и комбинационного рассеяния молекул, различающихся числом и расположением заместителей. Анализ вероятностей электронных переходов, отвечающих формированию однократно возбужденных конфигураций, в рамках одноэлектронного приближения при условии пренебрежимо малой релаксации всех остальных электронов.

15. Метод электронного парамагнитного резонанса. Состояния спиновых систем в постоянном магнитном поле. Оценка энергии состояний с применением теории возмущений. Оценка относительных вероятностей переходов между этими состояниями, инициируемых переменным магнитным полем. Энергии переходов. Модельные спектры радикалов, включающих одну или несколько спиновых систем, характеризующихся различными константами сверхтонкого взаимодействия.
16. Метод ядерного магнитного резонанса. Оценка энергии состояний спиновых систем. Энергии переходов. Модельные спектры синглетных молекул, включающих несколько спиновых систем эквивалентных ядер. Спектры низкого разрешения, в которых не проявляются спин-спиновые взаимодействия ядер. Спектры высокого разрешения: не проявляющиеся в тонкой структуре спектра взаимодействия эквивалентных ядер; мультиплетности сигналов; константы экранирования и химические сдвиги ядер.

Вопросы коллоквиума:

1. Электронные состояния молекул. Базовое приближение при описании колебательно-вращательных состояний молекул: ядерный гамильтониан в адиабатическом приближении; переход к молекулярной системе координат (с помощью углов Эйлера).
2. Колебательно-вращательные состояния двухатомных молекул: (1) квадратичная аппроксимация потенциала; задача о жестком ротаторе и гармоническом осцилляторе; (2) уточнение решения: (а) ангармоническая аппроксимация потенциала (потенциалы Леннард-Джонса и Морзе) и энергии колебательных состояний осциллятора Морзе; (б) учет колебательно-вращательного взаимодействия и способ аппроксимации вращательной постоянной в зависимости от колебательного возбуждения молекулы.
3. Сходство и различия в общем решении ядерной задачи (пп. 1 и 2) в случае двух- и многоатомных молекул.
4. Основные допущения, используемые при оценке вероятности поглощения излучения молекулами. Границы применимости теории возмущений. Дипольное приближение. Применение метода разделения переменных при анализе матричных элементов $\langle \Psi_m | d_\alpha | \Psi_n \rangle$ ($\alpha = x, y, z$).
5. Электронные переходы. Принцип Франка—Кондона. Факторы Франка—Кондона в зависимости от различия равновесных конфигураций в начальном и конечном состояниях молекулы (иллюстрация на примере двухатомной молекулы). Выделение прогрессий и секвенций (последовательностей) линий. Определение ω_e и $\omega_e x_e$ в основном и возбужденном состояниях молекулы. Оценка энергии диссоциации молекулы. Можно ли на основании спектральных данных восстановить потенциальную кривую двухатомной молекулы?
6. Колебательно-вращательные переходы в двухатомных молекулах. Правила отбора по v (колебательному квантовому числу) и J (вращательному квантовому числу). Общий вид (структура) колебательной полосы. Определение молекулярных постоянных из спектров: B_v , B_v' , B_e , α_e , γ_e , относительные заселенности различных вращательных состояний молекулы. Как определить ω_e и $\omega_e x_e$? Влияние изотопного состава на вид и структуру колебательной полосы двухатомной молекулы.

9. Образовательные технологии

Лекции и семинары с использованием мультимедийных презентаций; коллоквиумы по базовым теоретическим и практическим аспектам спектральных методов.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Учебники и монографии, освещающие отдельные разделы курса; методические разработки, посвященные экспериментальной регистрации и анализу электронных и колебательных спектров, нацеленному на извлечение структурных и энергетических характеристик молекул.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. У. Флайгер, "Строение и динамика молекул", Москва: Мир, 1982, том 1 (главы 1, 3, 4).
2. Ф. Банкер, П. Йенсен, "Симметрия молекул и спектроскопия", Москва: Мир, 2004 (главы 1-5, 10,11,14,15).
3. А.С. Давыдов, "Квантовая механика", (главы 9 и 12)
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, т.1 "Механика" (главы 5 и 6), т. 3 "Квантовая механика" (главы 6 и 13), т. 2 "Теория поля" (главы 4 и 6).
5. Ю.В. Новаковская, "Молекулярные системы: теория строения и взаимодействия с излучением", Москва: УРСС, 2004, ч. II "Квантовые состояния молекул", ч. III "Полуклассическая теория взаимодействия молекул с излучением".

Дополнительная литература

1. П.А. Браун, А.А. Киселев, "Введение в теорию молекулярных спектров", Ленинград: Изд. ЛГУ, 1983.
 2. А.А. Мальцев, "Теоретическое введение к практическим работам по молекулярной спектроскопии", Москва: Изд. МГУ, 1975.
 3. Р. Драго, "Физические методы в химии", 2 тома, Москва: Мир, 1981.
 4. Е. Вильсон, Дж. Дешиус, П. Кросс. "Теория колебательных спектров молекул", Москва: Изд. ин. лит., 1960.
- Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

1. NIST (National Institute of Standards) Chemistry WebBook, NIST Standard reference Database number 69, <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. Computational chemistry comparison and benchmark database, release 18, standard reference database 101, <http://cccbdb.nist.gov/>

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

доктор физико-математических наук, профессор Новаковская Юлия Вадимовна,

[e-mail jvnovakovskaya@gmail.com](mailto:jvnovakovskaya@gmail.com),

8-495-939-48-62

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.

2. Примеры практических контрольных заданий (ПКЗ)

Контрольная работа 1

- Определить тип молекулярного волчка и оцените соотношение главных моментов инерции предложенных частиц. Указать на рисунке молекулярной структуры расположение осей молекулярной системы координат, прокомментировав их положение по отношению к определенным структурным фрагментам и/или элементам симметрии частицы.
- Определить точечную группу симметрии, построить колебательное представление и указать, сколько колебаний какой симметрии есть у предложенной молекулы.
- На основании представленных в таблице значений предложить аппроксимацию сечения поверхности потенциальной энергии, отвечающего внутреннему вращению функциональных групп в предложенной молекуле. Пояснить выбор координаты и охарактеризовать структуры, отвечающие экстремальным точкам данного сечения. Сравните результаты, получающиеся при использовании одного наиболее существенного члена ряда Фурье и при его дополнении следующим с подходящим периодом .

Контрольная работа 2

- Определите число линий в ИК- спектрах поглощения и комбинационного рассеяния предложенной молекулы.
- Формально однократно возбужденные конфигурации молекулы могут возникать при переходе электрона с высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) на виртуальные орбитали (МО). Считая однодетерминантное приближение применимым для описания всех интересующих состояний молекулы и полагая изменение остальных орбиталей при таком возбуждении

пренебрежимо малым, на основании приведенных изображений ВЗМО я ряда виртуальных МО указать, какие возбуждения с наибольшей вероятностью должны реализоваться при поглощении данной молекулой энергии излучения с подходящей частотой, а какие наименее вероятны.

- Согласно анализу ЭПР-спектра предложенного радикала были определены константы сверхтонкого взаимодействия. На основании этих данных определить характер локализации орбитали неспаренного электрона и представить качественный вид зарегистрированного ЭПР-спектра.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Экзамен проводится в устной форме и состоит в обсуждении теоретических вопросов экзаменационных билетов и решении модельных задач. Основной билет включает два теоретических вопроса: первый вопрос – по одной из тем 1–8 курса; второй вопрос – по одной из тем 9–16 курса. При условии неудовлетворительного ответа студента хотя бы на одной контрольной работе или коллоквиуме его основной билет дополняет одна из типичных задач, предлагаемых на контрольных работах и коллоквиуме. Уровень знаний студента оценивается по пятибалльной шкале.

3. Примеры вопросов итоговой аттестации (экзамена)

- Ядерное уравнение в адиабатическом приближении.
- Теорема Гельмана-Фейнмана.
- Естественные (внутренние) переменные и Z -матрица.
- Матрица поворота.
- Условия Эккарта.
- Вращательный гамильтониан молекулы при полном разделении колебаний и вращения.
- Классификация молекулярных волчков.
- Нормальные координаты.
- Колебательный гамильтониан молекулы в случае полного разделения колебаний и вращения и квадратичной аппроксимации потенциала.
- Общее выражение для энергии колебательных состояний молекулы при учете ангармонизма и взаимодействия колебаний.
- Гамильтониан внутреннего вращения.
- Эффект Яна-Теллера.
- Гамильтониан молекулы в электромагнитном поле.
- Общее выражение для вероятности переходов между состояниями молекулы с поглощением излучения.
- Правила отбора для колебательного спектра поглощения многоатомной молекулы.

- Вращательная структура колебательной полосы в спектре поглощения двухатомной молекулы.
- Общее выражение для вероятности переходов между состояниями молекулы с рассеянием излучения.
- Правила отбора для колебательного спектра рассеяния многоатомной молекулы.
- Магнитный дипольный момент: орбитальная и спиновая составляющие.
- Эффект Зеемана.
- Модельный гамильтониан метода ЭПР (для дублетной частицы).
- Спин-спиновые взаимодействия и мультиплетность сигналов в спектре ЭПР.
- Модельный гамильтониан метода ЯМР (для синглетной частицы).
- Спин-спиновые взаимодействия и мультиплетность сигналов в спектре ЯМР.