

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Строение молекул. Структура и реакционная способность
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	4
квалификация:	бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

7 (осенний) - Дифференцированный зачет

8 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 60 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 90 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 180, всего зач. ед.: 4

Программу составил: С.О. Травин, д-р хим. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики 26.12.2024

Аннотация

Курс «Строение молекул. Структура и реакционная способность» предусматривает ознакомление обучающихся с разделами химической физики, описывающими квантово-химическую теорию строения молекул, их энергетические уровни, строение и реакционную способность.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление обучающихся с квантово-химической теорией строения молекул, энергетическими характеристиками и реакционной способностью.

Задачи дисциплины

- знакомство с понятиями и терминами квантовой химии, формирование базовых знаний и представлений о строении молекул, их свойствах симметрии, вырождении энергетических уровней;
- связь структуры и реакционной способности, базовые представления теории абсолютных скоростей реакций, модели расчета констант скорости элементарных процессов в газовой и жидкой фазе;
- приобретение теоретических знаний о взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами, основы кинетики фотопроцессов.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
УК-6 Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.2 Способен планировать самостоятельную деятельность в решении профессиональных задач; подвергать критическому анализу проделанную работу; находить и творчески использовать имеющийся опыт в соответствии с задачами саморазвития
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей
	ПК-4.2 Знает источники происхождения и умеет производить оценку погрешности измерений и достоверности экспериментальных результатов
	ПК-4.1 Знает численные порядки величин, характерных для соответствующей профессиональной области

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- основные представления теории строения молекул;
- основные представления теории взаимодействия излучения с молекулами;
- порядки численных величин, характерные для молекулярной физики;
- историю изменения представлений о строении молекул и их взаимодействии с электромагнитным излучением;
- основные законы фотохимии, иметь сведения о механизмах фотохимических процессов.

уметь:

- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных молекулярных процессов;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента в области строения молекул;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- физическими и химическими принципами и методами изучения молекулярных систем;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер как основа микроскопической теории строения молекул и химических превращений	2			4
2	Приближенные подходы к решению электронного уравнения Шредингера для молекулярных систем	2			4
3	Симметрия молекул. Применение теории групп к анализу уравнения Шредингера для молекулярных систем	2			4
4	Электронная структура атома и его квантовые числа. Многоэлектронная проблема. Метод самосогласованного поля.	2			4
5	Происхождение химической связи в двухатомной молекуле в модели независимых электронов на примере иона H_2^+	2			4
6	Химическая связь в многоатомных молекулах с локализованными связями в рамках модели независимых электронов	2			4
7	Характеристики химических связей в многоатомных молекулах. Метод Гиллеспи.	2			4

8	Комплексы переходных металлов. Координационная теория Вернера. Метод кристаллического поля и поля лигандов.	2			4
9	Химическая связь в молекулах с сопряженными связями. Теория резонанса. Представление об ароматических соединениях	2			4
10	Структурно нежесткие молекулы. Таутомерия. Спектральные методы исследования структуры молекул	2			4
11	Сохранение орбитальной симметрии. Правило Вудворда-Хоффмана	2			4
12	Теория абсолютных скоростей реакций. Метод переходного состояния (Теория активированного комплекса)	2			4
13	Механизм элементарных газофазных реакций. Схема Линдемана и модель РРKM	2			4
14	Перенос электрона в полярных средах. Теория Маркуса	2			4
15	Многэлектронные процессы. Линейные соотношения свободных энергий. Супрамолекулярные машины	2			4
16	Колебательно-вращательные состояния стабильных многоатомных молекул	2			2
17	Электромагнитное поле в квантовой теории	2			2
18	Теория возмущений, зависящих от времени	2			2
19	Взаимодействие квантованного электромагнитного поля излучения с молекулярной системой	2			2
20	Правила отбора и интенсивность спектральных линий излучения атомов	2			2
21	Правила отбора и интенсивность спектральных линий излучения двухатомных молекул	2			2
22	Внутримолекулярные процессы обмена энергией	2			2
23	Особенности распределения электронной плотности в электронно-возбужденном состоянии	2			2
24	Поглощение полихроматического света молекулами	2			2
25	Особенности фотохимических реакций. Законы фотохимии	2			2
26	Фотосинтез, запасание солнечной энергии	2			2
27	Процессы диссипации энергии электронно-возбужденных состояний	2			2
28	Фотореакции в газовой и конденсированной фазе	2			2
29	Фотополимеризация	2			2
30	Супрамолекулярная фотоника	2			2
Итого часов		60			90
Подготовка к экзамену		30 час.			

Общая трудоёмкость	180 час., 4 зач.ед.
--------------------	---------------------

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Уравнение Шредингера для системы электронов и ядер как основа микроскопической теории строения молекул и химических превращений

Уравнение Шредингера. Нерелятивистский и релятивистский вклады. Относительный порядок величины различных вкладов

2. Приближенные подходы к решению электронного уравнения Шредингера для молекулярных систем

Приближение центрального поля. Одноэлектронные атомные уровни энергии и волновые функции (атомные орбитали). Многоэлектронные атомные состояния.

3. Симметрия молекул. Применение теории групп к анализу уравнения Шредингера для молекулярных систем

Точные и приближенные свойства симметрии. Основные понятия теории представления групп. Неприводимые представления группы симметрии гамильтониана и его собственные состояния

4. Электронная структура атома и его квантовые числа. Многоэлектронная проблема. Метод самосогласованного поля.

Правильные полиэдры в строении молекул. Элементы симметрии по Шёнфлису. Основные понятия теории представления групп. Неприводимые представления группы симметрии гамильтониана и его собственные состояния. Четность и нечетность состояний. Правила отбора.

5. Происхождение химической связи в двухатомной молекуле в модели независимых электронов на примере иона H_2^+

Приближение Борна-Оппенгеймера. Адиабатические электронные термы. Стационарная теория возмущений Рэлея-Шредингера. Эффект квазипересечения уровней энергии в случае зависимости гамильтониана модели от параметра

6. Химическая связь в многоатомных молекулах с локализованными связями в рамках модели независимых электронов

Стационарная теория возмущений Рэлея-Шредингера для невырожденных и вырожденных состояний дискретного спектра. Использование вариационного принципа для решения электронного уравнения Шредингера и модели с конечным числом электронных состояний

7. Характеристики химических связей в многоатомных молекулах. Метод Гиллеспи.

Теорема Гельмана-Фейнмана для иона H_2^+ . Два нижних электронных состояния H_2^+ в приближении линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Кулоновский и резонансный интегралы и интеграл перекрытия. Связывающая и разрыхляющая молекулярные орбитали и природа различия между ними

8. Комплексы переходных металлов. Координационная теория Вернера. Метод кристаллического поля и поля лигандов.

Модель независимых электронов для многоатомных молекул. Делокализованные молекулярные орбитали и локализованные орбитали связей. Гибридизация и ее связь с геометрической структурой молекул. - и -связи. Правила Гиллеспи

9. Химическая связь в молекулах с сопряженными связями. Теория резонанса. Представление об ароматических соединениях

Отклонение от аддитивности энергий связей в ароматических углеводородах. Делокализованные молекулярные пи-орбитали в ароматических соединениях. Энергетический стабилизирующий эффект делокализации пи-электронов. Ароматические, неароматические и антиароматические молекулы

10. Структурно нежесткие молекулы. Таутомерия. Спектральные методы исследования структуры молекул

Координационная теория Вернера. Квантово-химический подход к описанию соединений 3d (4f) элементов. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Лиганды сильного и слабого поля. Координационные полиэдры. Эффект Яна-Теллера. Понятие о лабильности комплексов. Комплексы с полидентатными лигандами

11. Сохранение орбитальной симметрии. Правило Вудворда-Хоффмана

Основные типы структурной нежесткости. Методы исследования структурно нежестких молекул. Электронная природа структурной нежесткости. Политопные перегруппировки. Внутреннее вращение. Пирамидальная инверсия трикоординированных структур. Водородные связи. Знакомство с супрамолекулярной химией. Клатраты, краун-эфиры и криптанды

12. Теория абсолютных скоростей реакций. Метод переходного состояния (Теория активированного комплекса)

Поверхности потенциальной энергии, энергия активации, частоты колебаний в активированном состоянии. Реакции диссоциации и соединения, устойчивые и неустойчивые комплексы, трансмиссионный коэффициент, эмпирические закономерности для активированного состояния. Статистический расчет скоростей реакций, суммы состояний, уравнения для удельных скоростей, детальный разбор реакции между атомами и молекулами водорода.

13. Механизм элементарных газофазных реакций. Схема Линдемана и модель РРКМ

Орбитали и химическая связь, корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии, теория электроциклических реакций. Теория циклоприсоединения и циклораспада. Правила Вудворда-Хоффмана. Исключения

14. Перенос электрона в полярных средах. Теория Маркуса

Внутрисферные и внешнесферные реакции. Подход Таубе и подход Маркуса. Принцип Франка-Кондона. Линейные соотношения свободных энергий. Антимаркусовский диапазон.

15. Многоэлектронные процессы. Линейные соотношения свободных энергий. Супрамолекулярные машины

Многоэлектронные окислительно-восстановительные реакции. Принцип линейного соотношения свободных энергий

Семестр: 8 (Весенний)

16. Колебательно-вращательные состояния стабильных многоатомных молекул

Колебательно- вращательные состояния стабильных многоатомных молекул Модель жесткий волчок- совокупность гармонических осцилляторов. Нормальные колебания и их связь со свойствами симметрии молекул. Ангармонизм колебаний в многоатомных молекулах. Резонанс Ферми

17. Электромагнитное поле в квантовой теории

Электромагнитное поле в квантовой теории Квантование электромагнитного поля. Фотоны и классические электромагнитные волны. Когерентные состояния электромагнитного поля. Оператор взаимодействия электромагнитного поля с молекулярной системой

18. Теория возмущений, зависящих от времени

Теория возмущений, зависящих от времени Представление взаимодействия Дирака. Вероятность перехода в единицу времени, золотое правило Ферми

19. Взаимодействие квантованного электромагнитного поля излучения с молекулярной системой

Взаимодействие квантованного электромагнитного поля излучения с молекулярной системой. Вероятность спонтанного излучения фотона возбужденной молекулярной системой. Электро-дипольное приближение. Поглощение и индуцированное излучение. Коэффициенты Эйнштейна. Уширение линии излучения. Сечение поглощения излучения молекулярной системой

20. Правила отбора и интенсивность спектральных линий излучения атомов

Правила отбора и интенсивность спектральных линий излучения атомов. Понятие о неприводимых тензорных операторах. Правила отбора для электро-дипольных переходов в атомах и порядок величины вероятностей излучения фотона в единицу времени для разрешенных переходов

21. Правила отбора и интенсивность спектральных линий излучения двухатомных молекул

Особенности фотохимических реакций. Фотофизические и фотохимические процессы. Первичные и темновые процессы. Фотосинтез, запасание солнечной энергии. Полиграфия и электроника. Регистрация информации. Фотодеструкция полимеров, окрашенных материалов

22. Внутримолекулярные процессы обмена энергией

Внутримолекулярные процессы переноса энергии. Вероятность спонтанного излучения фотона возбужденной молекулярной системой. Электро-дипольное приближение. Поглощение и индуцированное излучение

23. Особенности распределения электронной плотности в электронно- возбужденном состоянии

Закон затухания излучающего возбужденного состояния молекулы и распределение излученных фотонов по частотам. Лоренцев контур линии излучения

24. Поглощение полихроматического света молекулами

Особенности распределения электронной плотности в электронно- возбужденном состоянии. Энергетический фактор. Кинетический фактор

25. Особенности фотохимических реакций. Законы фотохимии

Количественная мера поглощения света – закон Бугера-Ламберта-Бэра. Поглощение полихроматического света молекулами 2-х сортов. Сокращенное обозначение электронной конфигурации

26. Фотосинтез, запасание солнечной энергии

Классификация фотохимических реакций. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение. Фотоперенос электрона. Законы фотохимии

27. Процессы диссипации энергии электронно-возбужденных состояний

Процессы диссипации энергии электронно-возбужденных состояний. Характеристики флуоресценции: спектр флуоресценции, квантовый выход, время жизни. Происхождение колебательной структуры в спектре флуоресценции

28. Фотореакции в газовой и конденсированной фазе

Фотореакции в газовой и конденсированной фазе. Клеточный эффект. Газовая фаза. Конденсированная (жидкая) фаза. Специфика фотореакций в твердых матрицах. Стабилизация фотопродуктов. Влияние среды на направление протекания реакции. Сольватация

29. Фотополимеризация

Фотополимеризация. Фотогенерирование свободных радикалов: реакция фотодиссоциации (фотофрагментации), фотоиндуцированного отрыва атома водорода и окислительно-восстановительная фотореакция. Антрахинон и тетрагидрофуран. Бензофенон и третичные амины. Реакция с карбонилами переходных металлов. Фотосенсибилизация красителями

30. Супрамолекулярная фотоника

Супрамолекулярная фотоника. Движущие силы самоорганизации молекул и образование супрамолекулярных систем. Системы на основе краун-эфиров. Строение неперделных красителей. Сэндвичевые комплексы. Супрамолекулярные системы на основе кукурбитурилов. Спектрально-кинетические исследования J-агрегации

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, снабженная доской, экраном, проектором

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997, 558 с.
2. Майер И. Избранные главы квантовой химии М.: БИНОМ, 2006, 384 с.
3. Громов С. П., Захарова Г. В., Ушаков Е. Н., Чибисов А. К. “Основы фотоники молекул органических соединений и супрамолекулярных систем.” – 2024. – НГБ. – Москва, 256 с

Дополнительная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Слэтер Дж. Электронная структура молекул
Перевод с англ. А. Д. Суханова и В. К. Федянина; Под ред. Д.А. Бочвара. - Москва : Мир, 1965, 587 с.
2. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001, 519 с.
3. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968, 435 с.
4. Дмитриев И.С. Симметрия в мире молекул Л. «Химия», 1976, 128 с.
5. Р. Гиллеспи. Геометрия молекул. Пер. с англ. Е.З. Засорина и В.С. Мاستрюкова. Под ред. Ю.А. Пентина. М., «Мир», 1975, 287 с.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Не предусмотрены.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Успешная сдача дифференцированного зачета (осенний семестр) и экзамена (весенний семестр) подразумевает, что студент:

- ориентируется в литературе по предмету и в состоянии быстро найти необходимые формулы и справочные материалы;
- способен решить типовые задачи и найти кратчайший путь к решению, что особенно ценно;
- способен довести решение до численного значения;
- понимает ограничения и допустимые пределы использования тех или иных приближений.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики
курс:	<u>4</u>
квалификация:	бакалавр
Семестры, формы промежуточной аттестации:	
7 (осенний) - Дифференцированный зачет	
8 (весенний) - Экзамен	
Разработчик:	С.О. Травин, д-р хим. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
УК-6 Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.2 Способен планировать самостоятельную деятельность в решении профессиональных задач; подвергать критическому анализу проделанную работу; находить и творчески использовать имеющийся опыт в соответствии с задачами саморазвития
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей
	ПК-4.2 Знает источники происхождения и умеет производить оценку погрешности измерений и достоверности экспериментальных результатов
	ПК-4.1 Знает численные порядки величин, характерных для соответствующей профессиональной области

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Строение молекул. Структура и реакционная способность» обучающийся должен:

знать:

- основные представления теории строения молекул;
- основные представления теории взаимодействия излучения с молекулами;
- порядки численных величин, характерные для молекулярной физики;
- историю изменения представлений о строении молекул и их взаимодействию с электромагнитным излучением;
- основные законы фотохимии, иметь сведения о механизмах фотохимических процессов.

уметь:

- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных молекулярных процессов;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента в области строения молекул;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- физическими и химическими принципами и методами изучения молекулярных систем;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками теоретического анализа реальных задач, связанных со свойствами молекул, электромагнитного излучения и взаимодействия между ними.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

В целях текущего контроля успеваемости на занятии может проводиться краткий опрос по темам предыдущего занятия.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы для проведения дифференцированного зачета в осеннем семестре:

- 1) Уравнение Шредингера для молекулы. Нерелятивистский и релятивистский вклады
- 2) Приближение Борна-Оппенгеймера для молекулы. Адиабатические электронные потенциальные поверхности и неадиабатическая связь.
- 3) Теория возмущений Рэлея-Шредингера для невырожденных квантовых состояний. Поправки первого и второго порядка к уровням энергии. Условия применимости.
- 4) Теория возмущений Рэлея-Шредингера для вырожденных квантовых состояний и переход к модели конечного числа состояний.
- 5) Модель двух квантовых состояний и эффект квазипересечения уровней энергии в случае зависимости гамильтониана модели от параметра. Адиабатические и неадиабатические состояния.
- 6) Модель независимых электронов для атома. Квантовые числа и порядок одноэлектронных уровней энергии. Характер распределения электронной плотности для атомных s- и p-орбиталей.
- 7) Многоэлектронные состояния атома. Роль принципа Паули. Квантовые числа электронной конфигурации, терма, уровней тонкой структуры. Правила Гунда.
- 8) Качественный вид потенциальных кривых двухатомных молекул. Адиабатические и неадиабатические потенциальные кривые гетерополярных молекул типа KCl.
- 9) Модель независимых электронов для двухатомной молекулы при межъядерных расстояниях, близких к равновесному. Квантовые числа одноэлектронных состояний.
- 10) Многоэлектронная двухатомная молекула при межъядерных расстояниях, близких к равновесным. Роль принципа Паули. Квантовые числа электронной конфигурации, терма, уровней тонкой структуры. Правила Гунда.
- 11) Два нижних состояния H_2^+ в приближении линейной комбинации атомных орбиталей. Кулоновский и резонансный интегралы и интеграл перекрытия. Связывающая и разрыхляющая молекулярные орбитали и природа различия между ними.
- 12) Вариационный принцип для нижнего собственного значения электронного уравнения Шредингера для иона H_2^+ .
- 13) Теорема Гельмана-Фейнмана для иона H_2^+ .
- 14) Молекулярные орбитали для гомоядерной двухатомной молекулы. Связывающие и разрыхляющие орбитали и определение характера орбиталей с помощью метода линейной комбинации атомных орбиталей и диаграмм распределения электронной плотности атомных орбиталей.
- 15) Относительное расположение одноэлектронных уровней в гомоядерной двух-атомной молекуле. Связь между набором чисел заполнения одноэлектронных молекулярных уровней энергии в основном электронном состоянии и числом химических связей на примере молекулы N_2 .
- 16) Корреляционные диаграммы для одноэлектронных уровней энергии гомоядерной двухатомной молекулы, описывающие вариацию этих уровней при переходе от больших межъядерных расстояний к малым.
- 17) Модель независимых электронов для многоатомных молекул. Делокализованные молекулярные орбитали и локализованные орбитали связей на примере молекулы H_2O .
- 18) Тетраэдрическая структура CH_4 и sp^3 -гибридизация атомных орбиталей в атоме C.
- 19) Две двойные связи в линейной молекуле CO_2 и sp -гибридизация атомных орбиталей в атоме C.
- и -связи.
- 20) Двойная $C=C$ связь в этилене и sp^2 -гибридизация атомных орбиталей в атоме C. - и -связи.
- 21) Отклонение от аддитивности энергий связей в ароматических углеводородах и его объяснение делокализацией электронов -связей между атомами C на примере молекулы бензола.

- 22) Электронно-колебательно-вращательные состояния двухатомной молекулы, их квантовые числа и свойства симметрии. Влияние спина ядер в случае гомоядерных молекул.
- 23) Координационная теория Вернера. Теория поля лигандов. Эффект Яна-Теллера.
- 24) Координационные полиэдры. e_g и t_{2g} -орбитали.
- 25) Правила Гиллеспи. Расположение электронов на валентных оболочках. Влияние неэквивалентности электронных пар.
- 26) Теория активированного комплекса. Энергия активации и предэкспонент. Трансмиссионный коэффициент.
- 27) Орбитальная симметрия и правило Вудворда-Хоффмана.
- 28) Мономолекулярные реакции. Схема Линдемана и модель РРКМ.
- 29) Теория Маркуса переноса электрона в полярных средах.
- 30) Структурно-нежесткие молекулы. Таутомерия.

Вопросы для проведения экзамена в весеннем семестре:

- 1) Классическое электромагнитное поле излучения как совокупность гармонических осцилляторов.
- 2) Квантование электромагнитного поля, фотоны.
- 3) Классический предел для квантованного электромагнитного поля. Когерентные состояния квантованного электромагнитного поля.
- 4) Взаимодействие квантованного электромагнитного поля излучения с молекулярной системой.
- 5) Теория зависящих от времени возмущений. Вероятность перехода в единицу времени, золотое правило Ферми. Условия применимости понятия о вероятности перехода в единицу времени.
- 6) Спонтанное излучение возбужденной молекулярной системы. Вероятность излучения фотона в единицу времени в электро-дипольном приближении.
- 7) Принцип соответствия. Порядок величины этой вероятности.
- 8) Поглощение и индуцированное излучение. Коэффициенты Эйнштейна спонтанного и индуцированного излучения и поглощения и связь между ними.
- 9) Закон затухания излучающего возбужденного состояния молекулы и распределение излученных фотонов по частотам. Лоренцев контур линии излучения.
- 10) Механизмы уширения спектральных линий. Однородное и неоднородное уширение.
- 11) Точные и приближенные правила отбора
- 12) Правила отбора для излучательных электро-дипольных переходов в атомах.
- 13) Правила отбора для излучательных электро-дипольных переходов в двухатомных молекулах.
- 14) Колебательно-вращательные электро-дипольные излучательные переходы в двухатомной молекуле.
- 15) Электронно-колебательные электро-дипольные излучательные переходы в двухатомной молекуле. Принцип Франка-Кондона.
- 16) Преддиссоциация двухатомных молекул, формула Ландау для вероятности преддиссоциации.
- 17) Безызлучательные электронно-колебательные переходы в многоатомных молекулах
- 18) Колебания двухатомной молекулы - гармонический потенциал и потенциал Морзе. Роль эффектов ангармоничности.
- 19) Разделение поступательных, вращательных и колебательных движений в многоатомной молекуле. Условия Экарта.
- 20) Получение одиночных фотонов. Квантовые ямы, квантовые точки.
- 21) Инжекционная люминесценция. Спектры излучения п/п лазера.
- 22) Внутренний фотоэффект (фотопроводимость). Красная граница фотоэффекта.
- 23) Классификация фотохимических реакций. Фотодиссоциация. Фотоприсоединение.
- 24) Методы оптической (в том числе нелинейной) спектроскопии: адсорбционные, флуоресцентные, поляризационные, комбинационного рассеяния.
- 25) Фотонные кристаллы. Классификация фотонных кристаллов. Теория фотонных запрещенных зон.
- 26) Теория и методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул, релаксация, безызлучательное взаимодействие. Перенос заряда.

27) Принципы генерации предельно коротких световых импульсов. Синхронизация мод. Компрессия импульсов.

28) Обращение волнового фронта.

Примеры экзаменационных билетов:

Пример 1:

1. Квантование электромагнитного поля, фотоны.
2. Теория и методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул, релаксация, безызлучательное взаимодействие. Перенос заряда.

Пример 2:

1. Поглощение и индуцированное излучение. Коэффициенты Эйнштейна спонтанного и индуцированного излучения и связь между ними.
2. Разделение поступательных, вращательных и колебательных движений в многоатомной молекуле. Условия Экарта.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему систематизированные знания учебной программы дисциплины и умение применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Дифференцированный зачет проходит в формате доклада и защиты доклада: каждый из обучающихся готовит вопрос по выбору из списка утвержденных. При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 15 минут на сообщение, подготовленное в домашних условиях. Опрос обучающегося по итогам его выступления на устном дифференцированном зачете не должен превышать десяти минут.

Экзамен проводится в устном формате по билетам. В билете два теоретических вопроса. На подготовку к ответу предоставляется 40 минут. Опрос студента на экзамене не должен превышать 1 часа.