

Строение молекул Список вопросов по курсу лекций

Введение. Различные аспекты термина строение молекул.

I. Квантово-механическая модель молекулы.

1. Гамильтониан и уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение.
2. Электронное волновое уравнение. Антисимметричность электронной волновой функции относительно перестановок индексов электронов. Электронная плотность.
3. Приближенные методы решения электронного волнового уравнения. Одноэлектронное приближение. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Метод конфигурационного взаимодействия. Методы функционала плотности.
4. Полуэмпирические методы решения электронного уравнения: приближение нулевого дифференциального перекрытия, валентное приближение. Метод Хюккеля.
5. Распределение электронной плотности в молекулах. Порядки связей и заряды на атомах как характеристики электронного строения молекул. Атомы в молекулах (подход Бейдера). Соотношение квантовых и классических представлений о свойствах молекул с их строением. Аддитивные схемы.
6. Общие свойства симметрии молекулярных систем. Перестановочная симметрия и пространственная (точечная) симметрия. Молекулярная перестановочно-инверсионная группа симметрии.
7. Точечные группы симметрии молекул. Основные элементы симметрии. Представления и характеры представлений точечных групп симметрии. Вырождение энергетических уровней высокосимметричных систем.
8. Симметрия молекулярных орбиталей. Правило непересечения. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Использование принципа при анализе механизмов химических превращений.
9. Выделение переменных центра масс и вращательных переменных для системы ядер молекулы. Эйлеровы углы, задающие положение подвижной системы координат. Общий вид вращательного гамильтониана для свободной молекулы.
10. Потенциальная поверхность как графическое представление энергии электронной подсистемы в зависимости от геометрической конфигурации системы ядер молекулы. Общая характеристика потенциальных поверхностей. Равновесные конфигурации молекул.
11. Симметрия потенциальной поверхности. Утверждения о связи симметрии потенциальной поверхности с перестановочной симметрией системы ядер молекулы и с допустимой точечной симметрией этой системы.
12. Гамильтониан относительного движения (колебаний) многоатомной молекулы. Приближенные методы решения задачи о колебаниях молекул. Малые колебания: гармоническое приближение. Нормальные координаты и нормальные колебания. Учет симметрии при анализе задачи о колебаниях молекул.
13. Решение задачи о вращении молекулы как целого. Различные типы волчков.
14. Электрические свойства молекул. Дипольный момент и симметрия молекул. Полярные и неполярные молекулы. Поляризуемость молекул.
15. Молекула в магнитном поле. Магнитный момент молекул. Спин элементарных частиц. Орбитальная и спиновая составляющие магнитного момента. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул.
16. Электронно-колебательное взаимодействие. Эффекты Яна - Теллера.
17. Испускание, поглощение и рассеяние излучения. Матричные элементы операторов перехода. Дипольное приближение. Правила отбора, их связь с симметрией системы. Вероятности переходов

II. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул и переходы между ними.

18. Классификация состояний двух- и многоатомных молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния.

19. Вращательные состояния и вращательная энергия двухатомной молекулы. Вращательные постоянные. Вращательные спектры поглощения и комбинационного рассеяния двухатомных молекул. Правила отбора.

20. Вращательные состояния и вращательные спектры многоатомных молекул. Различия в спектрах волчков различных типов. Структурная информация, получаемая из вращательных спектров.

21. Колебательные состояния двухатомных молекул и колебательные постоянные (гармоническое приближение и осциллятор Морзе). Оценка энергии диссоциации двухатомной молекулы на основании ее колебательных постоянных.

22. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Правила отбора. Структурная информация, получаемая из колебательно-вращательных спектров.

23. Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул. Правила отбора. Структурная информация, получаемая из колебательно-вращательных спектров.

24. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Правила отбора. Принцип Франка-Кондона. Определение молекулярных постоянных по спектроскопическим данным.

25. Электронно-колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул. Правила отбора. Принцип Франка-Кондона. Определение молекулярных постоянных по спектроскопическим данным.

26. Спектры комбинационного рассеяния. Правила отбора.

27. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Спектры ЭПР и ЯМР.

III. Межмолекулярные взаимодействия.

28. Общая квантовомеханическая постановка задачи о межмолекулярном взаимодействии. Составляющие межмолекулярного взаимодействия.

IV. Механическая модель молекулы.

29. Механическая модель молекулы. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики. Примеры парных потенциалов взаимодействия атомов в молекулах: гармонический осциллятор, потенциал Морзе, потенциал Леннард-Джонса и др.

Рекомендуемая литература

1. Степанов Н. Ф. "Квантовая механика и квантовая химия." М.: Мир, 2001, 519 с.
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. "Теория строения молекул", учебное пособие. Ростов-Дон: Феникс, 1997, 407 с.
3. Татевский В.М. "Строение и физикохимические свойства молекул и веществ." М.: Изд-во МГУ, 1994, 463 с.
4. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф. "Теория групп и её применения в квантовой механике молекул." Вильнюс: Изд-во "Элком", 1999. 246 с.
5. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. "Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия". М.: Высш. шк., 1987. 366 с.
6. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. "Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы". М.: Высш. шк., 1989, 288 с.
7. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. "Задачи по теории строения молекул." Ростов-Дон: Феникс. 1997 г.
8. Новаковская Ю.В. "Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением", части I, II, III. Москва: УРСС, 2004, 2005