

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Фізичний факультет
Кафедра молекулярної фізики

Укладач:
Григор'єв Андрій Миколайович

БУДОВА МОЛЕКУЛ ТА ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК

РОБОЧА НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ

для студентів 4-го курсу фізичного факультету
спеціалізації „Молекулярна фізика”
спеціальності 6.070100

Київ 2009

Григор'єв А.М. Робоча навчальна програма дисципліни „Будова молекул та хімічний зв'язок” (для студентів 4-го курсу фізичного факультету спеціалізації „Молекулярна фізика” спеціальності 6.070100). – К.:, 2009. – 22 с.

Робоча навчальна програма містить загальну характеристику, тематичний план лекцій і лабораторних робіт, тематично-змістовну частину дисципліни „Будова молекул та хімічний зв'язок”, контрольні запитання та завдання і список літератури.

Укладач: кандидат фізико-математичних наук Григор'єв А.М.

Затверджено на засіданні кафедри молекулярної фізики фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка 7 травня 2009 року (протокол №11).

Затверджено на засіданні вченої ради фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка 18 травня 2009 року (протокол №12).

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА

Дисципліна “Будова молекул та хімічний зв’язок” для студентів фізичного факультету групи спеціалізації „Молекулярна фізика” є спеціальною дисципліною для спеціальності “Фізика” спеціалізації „Молекулярна фізика”, що читається в VIII семестрі в обсязі 4 кредитів, в тому числі 64 годин аудиторних занять, з них 48 годин лекцій і 16 годин лабораторних робіт і 80 годин самостійної роботи. Закінчується заліком у VIII семестрі.

Метою і завданням навчальної дисципліни “Будова молекул та хімічний зв’язок” є отримання базових знань з основ квантової хімії та теорії валентності.

Предмет навчальної дисципліни “Будова молекул та хімічний зв’язок” – це основні закономірності утворення хімічного зв’язку між атомами та зв’язок фізичних властивостей молекули з її просторовою будовою та електронною структурою.

Вимоги до знань та вмінь.

Студент повинен знати:

1. Електронну будову атомів та фізичний зміст атомних орбіталей.
2. Методи розрахунку електронної структури атомів та молекул в наближенні самоузгодженого поля.
3. Основи теорії молекулярних орбіталей (МО ЛКАО).
4. Електронну будову двохатомних молекул.
5. Типи хімічного зв’язку в двох- та багатоатомних молекулах.
6. Основи теорії симетрії та зв’язок фізичних властивостей молекул з її просторовою будовою.
7. Основні наближення теорії багатоелектронних систем, за допомогою яких виконується розрахунок будови молекул у відповідних сучасних програмних пакетах.

Студент повинен вміти:

1. Логічно і послідовно формулювати основні принципи і закони квантової хімії та теорії валентності.
2. Визначати електронну будову атомів та двохатомних молекул.
3. Пояснити фізичний зміст атомних та молекулярних орбіталей.
4. Пояснити будову найпростіших молекул (води, аміаку, метану тощо) на основі теорії МО ЛКАО.
5. Застосовувати теорію симетрії для визначення молекулярних орбіталей.
6. Користуватися програмами розрахунку структури та енергії молекули.
7. Самостійно працювати з літературою з квантової хімії та теорії валентності, у тому числі знаходити необхідні дані у відповідних довідниках.

Місце в структурно-логічній схемі спеціальності. Спеціальна навчальна дисципліна “Будова молекул та хімічний зв’язок” є складовою циклу професійної підготовки фахівців з молекулярної фізики освітньо-кваліфікаційного рівня „бакалавр”. Вона спирається на знання, отримані студентом, в рамках базових курсів з квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки та атомної фізики. У свою чергу, вона є підґрунтям для вивчення таких дисциплін як „Міжмолекулярна взаємодія”, „Електронна будова молекулярних систем” та „Сучасні проблеми фізики”.

Система контролю знань та умови складання заліку. Навчальна дисципліна „Будова молекул та хімічний зв’язок” оцінюється за **модульно-рейтинговою системою**. Вона складається з **3 модулів**. Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за **100 - бальною шкалою**.

Форми поточного контролю: оцінювання результатів виконання та захисту лабораторних робіт та домашніх самостійних завдань. Максимальна кількість балів, яку студент може отримати за виконання лабораторних робіт і домашніх завдань в одному модулі, дорівнює **10 балам**. Наприкінці кожного змістовного модулю проводиться контроль знань у вигляді **модульної письмової контрольної роботи**. Максимальна кількість балів,

яку студент може отримати за модульну контрольну роботу, дорівнює **10 балам**.

Підсумковий модульний контроль знань студента проводиться у формі **заліку**, під час якого може бути отримана максимальна кількість балів – **40 балів**.

Підсумкова семестрова рейтингова оцінка складається з семестрової модульної та екзаменаційної оцінок і дорівнює **100 балам**.

Підсумкова оцінка з дисципліни у балах 100-бальної шкали переводиться у **двобальну** (національну шкалу):

За 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою
60 – 100	Задовільно
35 – 59	Незадовільно
1 – 34	

При цьому, кількість балів відповідає оцінці:

1 – 34 – „незадовільно” з обов’язковим повторним вивченням дисципліни;

35 – 59 – „незадовільно” з можливістю повторного складання;

60 – 100 – „задовільно”.

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ

№ лекції	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	семінари/ лаборант., практичні	самоств. робота	інші форми контр.
<i>Змістовий модуль 1</i>					
1	Основні положення квантової механіки	2		3	
2	Наближені методи розв'язку задач квантової механіки	2		3	
3	Одноелектронні атоми	2		3	
4	Одноелектронні атоми	2		3	
5	Атом гелію	2		3	
6	Основні положення квантової механіки багатьох частинок	2		3	
7	Електронна будова багатоелектронних атомів	2		3	
8	Наближені методи розрахунку будови багатоелектронних атомів	2		3	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
Оцінка за модульну контрольну роботу					
Оцінка за лабораторні роботи					
<i>Змістовий модуль 2</i>					
9	Наближення Борна-Оппенгеймера	2		3	
10	Іон молекули водню. Природа хімічного зв'язку	2		3	
11	Метод молекулярних орбіталей – лінійних комбінацій атомних орбіталей (МО ЛКАО)	2		3	
12	Молекула водню	2		3	
13	Гомоядерні двоатомні молекули	2		3	

14	Гетероядерні двохатомні молекули	2		3	
15	Багатоатомні молекули	2		3	
16	Елементи теорії симетрії	2	2	4	
17	Симетрія молекулярних систем	2	2	4	
18	Симетрія молекулярних систем	2	2	4	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
Оцінка за модульну контрольну роботу					
Оцінка за лабораторні роботи					
<i>Змістовий модуль 3</i>					
19	Метод Хартрі-Фока для молекулярних систем	2	2	4	
20	Рівняння Рутана. Вибір базисних функцій	2	2	4	
21	Електронна кореляція	2	2	4	
22	Метод функціоналу густини	2	2	4	
23	Напівемпіричні методи розрахунку квантової хімії	2	2	4	
24	Програмні пакети для розрахунку електронної структури молекул	2		3	
МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА РОБОТА					
ЗАЛІК					
Оцінка за модульну контрольну роботу					
Оцінка за лабораторні роботи					
Оцінка за залік					
	ВСЬОГО	48	16	80	

Загальний обсяг 144 год., в тому числі:

лекції – 48 год.

лабораторні роботи – 16 год.

самостійна робота – 80 год.

ТЕМАТИЧНО – ЗМІСТОВНА ЧАСТИНА КУРСУ

Змістовий модуль 1

Лекція 1. Основні положення квантової механіки.

Постулати квантової механіки. Квантові стани і хвильова функція. Оператори і спостережні величини. Рівняння Шредінгера. Стаціонарні стани. Вимірювання та редукція хвильової функції. Чисті та змішані стани. Матриця густини.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3, 5]

Лекція 2. Наближені методи розв'язку задач квантової механіки.

Варіаційні методи розв'язку рівняння Шредінгера. Метод Релея-Рітца.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3-5]

Лекція 3. Одноелектронні атоми.

Розв'язок рівняння Шредінгера для атома водню. Імовірності та радіальні функції розподілу. Атомні орбіталі. Орбітальний кутовий момент. Фізичний зміст квантових чисел m та l . Атомні одиниці довжини та енергії.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3, 5-7]

Лекція 4. Одноелектронні атоми.

Спін електрона. Координатна і спінова частини хвильової функції. Спін-орбітальна взаємодія. Повний кутовий момент. Тонка структура спектра атома водню. Вплив електричного та магнітного полів.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3, 5]

Лекція 5. Атом гелію.

Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера для атома гелію. Кулонівський та обмінний інтеграли. Спектр атому гелію.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 5]

Лекція 6. Основні положення квантової механіки багатьох частинок.

Принцип тотожності частинок. Симетрія хвильової функції відносно перестановок частинок. Принцип заборони Паулі. Обмінна взаємодія. Спінова кореляція. Хвильова функція системи багатьох частинок. Спін-орбіталі. Детермінант Слетера.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 4, 5]

Лекція 7. Електронна будова багатоелектронних атомів.

Наближення самоузгодженого поля. Атомні орбіталі Слетера. Екранування заряду електрону та природа його виникнення. Принцип

побудови періодичної системи елементів Менделєєва. Потенціал іонізації та спорідненість до електрону. Розміри атомів.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 7]

Лекція 8. Наближені методи розрахунку будови багатоелектронних атомів.

Метод Хартрі-Фока. Рівняння Хартрі-Фока для спіно-орбіталей. Рівняння Хартрі-Фока для просторових орбіталей. Теорема Купмана.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 4, 5]

Матеріал, що винесений на самостійне вивчення

1. Енергетичні рівні багатоелектронних атомів в наближенні LS-зв'язку.
2. Енергетичні рівні багатоелектронних атомів в наближенні jj-зв'язку.

Контрольні запитання та завдання

1. Обчисліть сталу спіно-орбітальної взаємодії для 2p-електрону слетерівської атомної орбіталі та оцініть її для нейтральних атомів 2-го періоду періодичної таблиці елементів (від В до F).
2. Визначте загальну кількість спінових станів для системи з 4 частинок зі спіном $\frac{1}{2}$. Які спінові стани можливі для системи з 3 електронів, які знаходяться на різних орбіталях?

3. Знайти значення квантового числа повного орбітального моменту, який виникає як комбінація орбітальних моментів: а) двох d-електронів; б) одного d-електрону і одного f-електрону; в) трьох p-електронів. Для кожного випадку записати символи термів.
4. В рамках схеми j-j зв'язку визначте терми для електронної конфігурації sp.
5. В рамках схеми LS-зв'язку визначте систему термів для 9 еквівалентних d-електронів, для 2 еквівалентних f-електронів і для 2 еквівалентних p-електронів.
6. Розрахуйте енергію кулонівської взаємодії між двома електронами на водневоподібній 1s-орбіталі.
7. Визначте енергію основного стану атома гелію, розглянувши міжелектронну взаємодію як збурення.
8. За допомогою варіаційного методу розрахуйте енергію основного стану атома гелію, скориставшись пробною функцією $\psi = \sqrt{\xi^3/\pi} \exp(-\xi r)$. Чому дорівнюють потенціали іонізації для геліоподібних систем Li^+ , Be^{2+} , C^{4+} , O^{6+} .
9. Нехай в одномірній квадратній потенціальній ямі знаходиться два електрони. Один з електронів має $n = 1$, а інший $n = 2$. Зобразіть двовимірну контурну діаграму розподілу ймовірності електронів у випадку коли: їх спіни паралельні; їх спіни антипаралельні. Оцініть розмір фермі дірки.
10. Розгляньте збуджений атом гелію, в якому один з електронів знаходиться на водневоподібній орбіталі з квантовими числами n_1, l_1, m_1 , а інший – на орбіталі з квантовими числами n_2, l_2, m_2 . Розрахуйте енергетичні рівні цієї системи за допомогою теорії збурень.
11. Розрахуйте енергію відштовхування між електронами для стану $\sqrt{1/2}[(\varphi_1, \bar{\varphi}_2) - (\bar{\varphi}_1, \varphi_2)]$.
12. За допомогою правил Слетера визначте: а) значення орбітальних експонент атому фтору в основному стані; б) сталу екранування для АО

- 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d атому заліза; в) ефективний заряд ядра для 6s-електрону атома гадолінію.
13. Ортогоналізуйте за Шмідтом слетерівські орбіталі 1s і 2s атома літію.
 14. Запишіть детермінант Слетера для основного стану атома берилію та вираз для енергії цього стану через кулонівський та обмінний інтеграл.
 15. Пояснити загальну закономірність зміни потенціалу іонізації у елементів однієї групи періодичної системи, враховуючи розміри їх атомів і ефективні заряди атомів.
 16. Скільки віртуальних орбіталей визначається при обчисленні атому хлору методом Хартрі-Фока з використанням 20 базисних функцій?

Змістовий модуль 2

Лекція 9. Наближення Борна-Оппенгеймера.

Наближення Борна-Оппенгеймера. Поняття про поверхню потенціальної енергії. Шляхи та енергетика хімічної реакції.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 2, 7]

Лекція 10. Іон молекули водню. Природа хімічного зв'язку.

Якісний аналіз точного розв'язку рівняння Шредінгера для іону молекули водню. Молекулярні орбіталі. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема віріалу та природа хімічного зв'язку. Електростатична теорема.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 2, 7]

Лекція 11. Метод молекулярних орбіталей – лінійних комбінацій атомних орбіталей (МО ЛКАО).

Ідея метода МО ЛКАО. Іон молекули водню. Зв'язувальні та антизв'язувальні орбіталі. Класифікація молекулярних орбіталей. Енергія дисоціації.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 4, 7]

Лекція 12. Молекула водню.

Розв'язок рівняння Шредінгера для молекули водню за допомогою метода МО ЛКАО. Класифікація енергетичних рівнів молекули водню. Конфігураційна взаємодія. Правило непересікання термів.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 2]

Лекція 13. Гомоядерні двохатомні молекули.

Молекулярні орбіталі та енергетичні рівні гомоядерної двохатомної молекули. s -, p -перекриття та інтеграл перекриття атомних орбіталей. Електронні конфігурації гомо-ядерних двохатомних молекул. Кратність зв'язку.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3]

Лекція 14. Гетероядерні двоатомні молекули.

Молекулярні орбіталі та енергетичні рівні гетероядерної двоатомної молекули. Електронні конфігурації гетероядерних двоатомних молекул. Іонність зв'язку. Ковалентні, полярні та іонні зв'язки.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1, 3]

Лекція 15. Багатоатомні молекули.

Молекулярні орбіталі багатоатомних молекул. Гібридизація. Направленість хімічного зв'язку. Форми типових багатоатомних молекул: води, аміаку, метану. Ненасичені та ароматичні вуглеводні.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [3, 6]

Лекція 16. Елементи теорії симетрії.

Операції симетрії та класифікація молекул. Точкові групи молекул. Матричне представлення операцій симетрії. Характери та класи.

Лабораторна робота 1. Розрахунок молекули водню методом Хартрі-Фока в мінімальному базисі.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 7]

Лекція 17. Симетрія молекулярних систем.

Незвідні представлення. Розклад за незвідними представленнями. Базис представлення правильний за симетрією.

Лабораторна робота 2. Побудова таблиці характеристик молекул води, аміаку та метану.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 7]

Лекція 18. Симетрія молекулярних систем.

Симетрія молекули та виродженість енергетичних рівнів. Перетворення хвильових функцій при операціях симетрії. Побудова молекулярних орбіталей правильних за симетрією.

Лабораторна робота 3. Побудова молекулярних орбіталей молекул води, аміаку та метану правильних за симетрією за допомогою таблиці характеристик.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 7]

Матеріал, що винесений на самостійне вивчення

1. Метод валентного зв'язку. Резонанс.
2. Розрахунок молекули водню методом валентного зв'язку.

3. Топологічне визначення молекулярної структури. Виділення атомів в молекулах.
4. Вібронні взаємодії. Ефект Яна-Теллера.
5. Тунельний механізм перетворення структурно-нежорстких молекул.
6. Таутомерія.
7. Природа внутрішнього обертання.

Контрольні запитання та завдання

1. За допомогою варіаційного методу взявши пробну функцію у вигляді $\Psi = c_A \varphi_A + c_B \varphi_B$, де $\varphi_A = \pi^{-1/2} e^{-r_A}$ і $\varphi_B = \pi^{-1/2} e^{-r_B}$, знайдіть вираз для наближених хвильових функцій та енергії основного і першого збудженого стану іона молекули водню.
2. Обчисліть енергію основного стану іона молекули водню взявши пробну функцію у вигляді $\Psi = (\xi^3 / \pi)^{1/2} \exp(-\xi r_A)$.
3. Для розрахунку одноелектронного гомоядерного іону методом МО ЛКАО за пробну функцію взято $\Psi = c_A \varphi_A + c_B \varphi_B$. Знайдено, що $H_{AB} = -1$ а.о.; $H_{AA} = H_{BB} = -2$ а.о.; $S_{AB} = 0.25$. Обчисліть з цією функцією енергію основного стану даного іона та визначте вигляд наближеної ЛКАО-функції.
4. Скільки зв'язних та антизв'язних МО можна побудувати для іону молекули водню з набору 3d-орбіталей?
5. Обчисліть силову сталу для іона молекули водню методом МО ЛКАО.
6. Обчисліть густину імовірності електрону в іоні молекули водню посередині між ядрами водню як функцію відстані між ядрами R. Обчисліть різницю густин $\rho_{\pm} = \psi_{\pm}^2 - 0.5 \cdot (\psi_a^2 + \psi_b^2)$ на прямій, що сполучає ядра водню для R=130 пм.
7. Обчисліть густину імовірності того, що один з електронів молекули водню знаходиться в околі деякої точки на прямій, що сполучає ядра

- водню. Зобразіть різницю густин імовірностей $\rho_1 - 0.5 \cdot (\psi_a^2 + \psi_b^2)$ для $R=74$ пм.
8. Чи може існувати молекула He_2 у збудженому триплетному стані $^3\Sigma_u^+$?
 9. Визначте для молекули H_2 терми основного електронного станів і збуджених станів, які відповідають заповненню $1\sigma_u^*$ МО.
 10. Обчислити енергії, які відповідають $\sigma_g 1s$ - і $\sigma_u 1s$ - орбіталям H_2^+ .
 11. Визначте терми двохатомних гомоядерних молекул, яким відповідають електронні конфігурації π^2 ; σ^2 ; π^3 ; π^4 (еквівалентні електрони).
 12. Визначте молекулярні терми, які відповідають електронній конфігурації основного стану молекул C_2 , C_2^+ , C_2^- , N_2 , N_2^+ , N_2^- , O_2^+ , O_2^- , F_2^+ , F_2^- .
 13. Визначте молекулярні терми, які відповідають електронній конфігурації основного стану молекул NH , BeH , OH , FH , CO , NO , Ne_2^+ .
 14. Користуючись мінімальним базисом для опису МО молекули води покажіть, що віковий детермінант факторизується на $(1 \times 1) + (2 \times 2) + (3 \times 3)$ детермінантів. Запишіть віковий детермінант, позначивши кулонівські інтеграли α_n , α_o , α_o для $\text{H}1s$, $\text{O}2s$, $\text{O}2p$ та резонансні інтеграли β , β' для $(\text{O}2p, \text{H}1s)$, $(\text{O}2s, \text{H}1s)$. Знехтуйте перекриттям. Знехтуйте $2s$ -орбітальною та знайдіть енергію молекулярних орбіталей для валентного кута рівного 90° .
 15. Для молекули аміаку визначте елементи симетрії, побудуйте таблицю групового множення та визначте класи спряжених елементів.
 16. Визначте кількість елементів симетрії, кількість операцій симетрії, порядок групи, символ групи симетрії для молекул води, пероксиду водню, етану, метану, хлорметану.
 17. Побудуйте матриці третього порядку, які представляють операції симетрії групи C_3 .
 18. Розгляньте три водневоподібних $1s$ -орбіталі молекули аміаку. Знайдіть матричні представлення для операцій C_3 та σ_v у цьому базисі.

19. Користуючись базисом з чотирьох $1s$ -орбіталей атомів водню в молекулі метану, визначте матричні представлення для операцій C_3 та S_4 . Знайдіть характери цих операцій.
20. Визначте за якими незвідними представленнями групи T_d перетворюються чотири $1s$ -орбіталі атомів водню в молекулі метану.
21. У якій зі сполук у перелічених нижче парах більш полярний зв'язок: HCl або HI ; CH_4 або NH_3 , MgO або CaO .
22. Яка з перелічених нижче молекулярних систем має плоску структуру, а яка структуру тригональної піраміди: PCl_3 , NCl_3 , H_3O^+ , SO_3^{2-} , BF_3 , NO_3^- .
23. Написати sp^3 -гібридну функцію, напрямлену вздовж вісі z .
24. З'ясувати тип гібридизації атому вуглецю і делокалізацію π -електронів в таких сполуках: $CH_2=CH-CH=CH_2$, $CH\equiv CH-CH=CH_2$, $CH_3-CH=CH_2$.
25. Побудувати методом валентних зв'язків хвильову функцію основного стану молекули C_2 .

Змістовий модуль 3

Лекція 19. Метод Хартрі-Фока для молекулярних систем.

Метод Хартрі-Фока для молекулярних систем. Закриті та відкриті оболонки. Обмежений та необмежений метод Хартрі-Фока.

Лабораторна робота 4. Знайомство з програмним пакетом HyperChem. Створення файлів молекул.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 2, 4]

Лекція 20. Рівняння Рутана. Вибір базисних функцій.

Рівняння Рутана. Слетерівські та гаусовські базисні функції. Мінімальний базис. Інші найбільш поширені базиси. Порівняння точності розрахунків будови та енергії зв'язку молекул за допомогою різних базисів.

Лабораторна робота 5. Розрахунок геометрії молекул циклогексану та ацетилену за допомогою програмного пакету HyperChem.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 2, 4]

Лекція 21. Електронна кореляція.

Конфігураційна функція. Кореляційна енергія. Метод конфігураційної взаємодії. Метод багатоконфігураційних взаємодій. Метод теорії збурень. Порівняння методів розрахунку кореляційної енергії.

Лабораторна робота 6. Розрахунок молекулярних орбіталей молекул води та аміаку за допомогою програмного пакету HyperChem.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 2, 4]

Лекція 22. Метод функціоналу густини.

Теорема Хоенберга-Кона. Рівняння Кона-Шама. Орбіталі Кона-Шама. Обмінно-кореляційна енергія. Наближення локальної густини.

Лабораторна робота 7. Розрахунок електронної густини молекул води та аміаку за допомогою програмного пакету HyperChem.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1]

Лекція 23. Напівемпіричні методи розрахунку квантової хімії.

Огляд напівемпіричних методів. π -електронна теорія органічних молекул (проста теорія Хюккеля).

Лабораторна робота 8. Розрахунок коливального спектру молекул води та аміаку за допомогою програмного пакету HyperChem.

Завдання для самостійної роботи (4 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1, 6, 7]

Лекція 24. Програмні пакети для розрахунку електронної структури молекул.

Огляд програмних пакетів для розрахунку геометрії, електронної структури та коливального спектру молекул.

Завдання для самостійної роботи (3 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з виконаної лабораторної роботи.

Література [1]

Матеріал, що винесений на самостійне вивчення

1. Метод Томаса-Фермі розрахунку електронної густини квантових систем.

2. Наближення Парізера-Парра-Попла. Методи повного та часткового нехтування диференціального перекриття.

Контрольні запитання та завдання

1. При розрахунках електронної структури хлорметану визначте а) мінімальний базис; б) DZP базис. Скільки базисних функцій потрібно узяти в кожному випадку?
2. Визначте кількість базисних функцій при розрахунку електронної структури молекули етанолу за допомогою базисів: а) 6-31G; б) 6-31G^{*}; в) 6-31G^{**}.
3. Визначте загальну кількість детермінантів Слетера для розрахунку електронної структури молекули етанолу за допомогою базису 6-31G^{**}.
4. При обчисленні ²S основного стану атома літію методом КВ які з наступних детермінантів будуть входити до складу хвильової функції основного стану: а) $|\psi_{1s}^{\alpha}\psi_{1s}^{\beta}\psi_{2s}^{\alpha}|$; б) $|\psi_{1s}^{\alpha}\psi_{1s}^{\beta}\psi_{2s}^{\beta}|$; в) $|\psi_{1s}^{\alpha}\psi_{1s}^{\beta}\psi_{2p}^{\alpha}|$; г) $|\psi_{1s}^{\alpha}\psi_{2p}^{\alpha}\psi_{2p}^{\beta}|$; д) $|\psi_{1s}^{\alpha}\psi_{3d}^{\alpha}\psi_{3d}^{\beta}|$; е) $|\psi_{1s}^{\alpha}\psi_{2s}^{\alpha}\psi_{3s}^{\alpha}|$?
5. При обчисленні ³Σ_u збудженого стану молекули водню методом КВ які з наступних детермінантів будуть входити до складу хвильової функції основного стану: а) $|1\sigma_g^{\alpha}1\sigma_u^{\alpha}|$; б) $|1\sigma_g^{\alpha}1\pi_u^{\alpha}|$; в) $|1\sigma_u^{\alpha}1\pi_g^{\beta}|$; г) $|1\sigma_g^{\beta}3\sigma_u^{\beta}|$; д) $|1\pi_g^{\alpha}1\pi_u^{\alpha}|$; е) $|1\pi_u^{\beta}2\pi_u^{\beta}|$?
6. Доведіть теорему Брілюена.
7. Виведіть правила Слетера для матричних елементів гамільтоніану, утворених детермінантами Слетера.
8. Визначити, користуючись наближенням Хюккеля, яка конфігурація (лінійна або трикутна) буде найбільш стабільною для молекул Н₃⁺, Н₃, Н₃⁻.
9. Обчислити хюккелівські молекулярні орбіталі бутадієну і на основі цього обчислити електронні заряди і дипольний момент.

ПИТАННЯ ДО ЗАЛІКУ

Контрольні питання та завдання до I-го, II-го і III-го модулів одночасно є питаннями до заліку.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Atkins P.W., Friedman R.S. Molecular Quantum Mechanics. 3ed., Oxford, 1996.
2. Эткинс П. Физическая химия. В 2-х томах. – М.: Мир, 1980.
3. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: ВШ, 1995.
4. Szabo A., Ostlund N.S. Modern Quantum Chemistry. Intro to Advanced Electronic Structure Theory, Dover, 1996.
5. Вакарчук І.О. Квантова механіка. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2004.
6. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. – М.: Мир, 1968.
7. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.

ЗМІСТ

Загальна характеристика	2
Тематичний план лекцій і лабораторних робіт	5
Тематично – змістовна частина курсу	7
Питання до заліку	21
Рекомендована література	21
Зміст	22