

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

"\_\_" \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Теория симметрии в координационной химии М1.ДВ.2

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Штырлин В.Г.

**Рецензент(ы):**

Соломонов Б.Н.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2013

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) заведующий лабораторией Штырлин В.Г. лаборатория координационных соединений Отдел неорганической и координационной химии ,  
Valery.Shtyrlyn@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Получение знаний по теории симметрии и ее применению в описании структуры молекул, комплексов, интерпретации результатов в электронной, ко-лебательной и магнитной спектроскопии

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.ДВ.2 Общенаучный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1, 2 курсах, 2, 3 семестры.

Относится к циклу М1 общенаучных дисциплин, его вариативной части М1.ДВ.2 Опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: неорганическая химия, органическая химия, физическая химия, строение вещества, физические методы исследования, квантовая механика и квантовая химия

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью демонстрации общенаучных базовых знаний естественных наук, математики и информатики, понимание основных фактов, концепций, принципов теорий, связанных с прикладной математикой и информатикой
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и применять в исследовательской и прикладной деятельности современный математический аппарат
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью в составе научно-исследовательского и производственного коллектива решать задачи профессиональной деятельности
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости вид и характер своей профессиональной деятельности
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью использовать нормативные правовые документы в своей деятельности, проявлять настойчивость в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью осуществлять целенаправленный поиск информации о новейших научных и технологических достижениях в сети Интернет и из других источников

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

-элементы и операции точечной симметрии, математический и физический смысл неприводимых представлений, способы систематического построения таблиц характеров на основе генераторов групп и произведения подгрупп, формулу разложения и произведения неприводимых представлений, двойные группы и двузначные представления;

-алгебраическую теорию групп, операции с векторами и матрицами, неприводимые представления групп симметрии и их основные свойства, редукции приводимых представлений по симметрии и классификации термов атомов и молекул, правила отбора для матричных элементов

2. должен уметь:

ориентироваться в таблицах характеров групп, аспектах симметрии в теории кристаллического поля, корреляционных таблицах, термах многоэлектронных состояний, роли межэлектронного отталкивания и спин-орбитального взаимодействия при LS- и jj-связи

3. должен владеть:

навыками в области применения понятий теории симметрии к анализу оптической активности, дипольных моментов, стереохимически нежестких структур, эквивалентных атомов и диастереотопии, электронных, ИК- и КР-спектров, отнесении электронных переходов в спектрах поляризованного излучения

применять теорию симметрии к анализу оптической активности

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины отсутствует во 2 семестре; зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Элементы и операции точечной симметрии	2	1	0	2	0	устный опрос
2.	Тема 2. Некоторые применения понятий теории симметрии	2	2	0	2	0	контрольная работа
3.	Тема 3. Группы симметрии	2	3	0	2	0	устный опрос
4.	Тема 4. Некоторые свойства векторов и матриц	2	4-5	0	4	0	контрольная работа
5.	Тема 5. Представления групп	2	6-7	0	4	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Редукция приводимых представлений	2	8-9	0	4	0	контрольная работа
7.	Тема 7. Неприводимые представления и классификация термов	3	10-11	0	4	0	устный опрос
8.	Тема 8. Термы многоэлектронных состояний	3	12	0	2	0	контрольная работа
9.	Тема 9. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем	3	13-15	0	3	0	устный опрос
10.	Тема 10. Правила отбора для матричных элементов	3	16-18	0	1	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			0	28	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. Элементы и операции точечной симметрии

###### *практическое занятие (2 часа(ов)):*

Понятие симметрии в философии и естествознании. Инверсия. Отражение в плоскости симметрии. Собственное вращение вокруг оси симметрии. Несобственное вращение.

##### Тема 2. Некоторые применения понятий теории симметрии

###### *практическое занятие (2 часа(ов)):*

Алгоритм определения точечной группы симметрии молекул. Критерий оптической активности. Оптическая активность комплексов.

##### Тема 3. Группы симметрии

###### *практическое занятие (2 часа(ов)):*

Композиция (произведение) операций симметрии. Четыре основных свойства математической группы. Таблица умножения для группы.

##### Тема 4. Некоторые свойства векторов и матриц

###### *практическое занятие (4 часа(ов)):*

Генераторы группы. Прямые и полупрямые произведения групп. Операции над векторами. Скалярное произведение векторов.

##### Тема 5. Представления групп

###### *практическое занятие (4 часа(ов)):*

Преобразование подобия для матриц. Матрицы преобразований для операций симметрии. Отображения, изо- и гомоморфизм. Неприводимые представления и их основные свойства. Комплексно-сопряженные представления и их базисные функции. Таблицы характеров групп.

##### Тема 6. Редукция приводимых представлений

###### *практическое занятие (4 часа(ов)):*

Формула разложения. Произведения неприводимых представлений. Матрицы преобразований и неприводимые представления групп симметрии  $R(3)$  и  $Rh(3)$ . Произведения неприводимых представлений групп  $R(3)$  и  $Rh(3)$ , формула Клебша-Гордана.

### **Тема 7. Неприводимые представления и классификация термов**

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Классификация термов свободного атома. Аспекты симметрии в теории кристаллического поля. Редукция представлений группы  $R(3)$  в кристаллических полях симметрии  $Td$  и  $Oh$ .

### **Тема 8. Термы многоэлектронных состояний**

#### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Неприводимые представления групп  $C_{\infty v}$ ,  $D_{\infty h}$  и термы линейных молекул. Межэлектронное отталкивание и спин-орбитальное взаимодействие при LS- и jj-связи. Атомные термы. Расщепление под действием спин-орбитального взаимодействия термов с целочисленными значениями J.

### **Тема 9. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем**

#### **практическое занятие (3 часа(ов)):**

Расщепление термов конфигурации  $d^2$  (целочисленные J) в слабом и сильном кристаллических полях симметрии  $Oh$ . Определение спиновой мультиплетности состояний методом снижения симметрии.

### **Тема 10. Правила отбора для матричных элементов**

#### **практическое занятие (1 часа(ов)):**

Интенсивность электронных переходов. Источники интенсивности запрещенных переходов. Отнесение электронных переходов в спектрах поляризованного излучения. Классификация колебаний по типам симметрии.

## **4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

<b>N</b>	<b>Раздел Дисциплины</b>	<b>Семестр</b>	<b>Неделя семестра</b>	<b>Виды самостоятельной работы студентов</b>	<b>Трудоемкость (в часах)</b>	<b>Формы контроля самостоятельной работы</b>
1.	Тема 1. Элементы и операции точечной симметрии	2	1	подготовка к устному опросу	3	устный опрос
2.	Тема 2. Некоторые применения понятий теории симметрии	2	2	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
3.	Тема 3. Группы симметрии	2	3	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
4.	Тема 4. Некоторые свойства векторов и матриц	2	4-5	подготовка к контрольной работе	2	контрольная работа
5.	Тема 5. Представления групп	2	6-7	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
6.	Тема 6. Редукция приводимых представлений	2	8-9	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
7.	Тема 7. Неприводимые представления и классификация термов	3	10-11	подготовка к устному опросу	6	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
8.	Тема 8. Термы многоэлектронных состояний	3	12	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
9.	Тема 9. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем	3	13-15	подготовка к устному опросу	3	устный опрос
10.	Тема 10. Правила отбора для матричных элементов	3	16-18	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
	Итого				44	

### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- использованием раздаточного материала с изображением групп симметрии, геометрических фигур, строения молекул, со сложными математическими выражениями.
- использованием интернет-ресурсов различных поисковых систем, таких как [www.rambler.ru](http://www.rambler.ru), [www.yandex.ru](http://www.yandex.ru), [www.wail.ru](http://www.wail.ru), [www.yahoo.ru](http://www.yahoo.ru); [www.rushim.ru](http://www.rushim.ru), [www.chem.msu.ru](http://www.chem.msu.ru), [www.Scirus.com](http://www.Scirus.com), а также сайтов государственных ВУЗов: МГУ, СПбГУ, НГУ, ИК СО РАН, Scientopica, ChemWeb, ResearchIndex, ScientificWorld

### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

#### Тема 1. Элементы и операции точечной симметрии

устный опрос , примерные вопросы:

1. Понятие симметрии в философии и естествознании. 2. Дедуктивно-аксиоматический метод в теории симметрии

#### Тема 2. Некоторые применения понятий теории симметрии

контрольная работа , примерные вопросы:

3. Геометрический подход к теории симметрии. 4. Определение точечной симметрии

#### Тема 3. Группы симметрии

устный опрос , примерные вопросы:

5. Операции и элементы симметрии. 6. Собственное вращение вокруг оси симметрии, порядок оси вращения.

#### Тема 4. Некоторые свойства векторов и матриц

контрольная работа , примерные вопросы:

6. Правила ориентации молекул относительно системы координат. 7. Отражение в плоскости симметрии, преобразование координат при отражении в плоскости симметрии.

#### Тема 5. Представления групп

устный опрос , примерные вопросы:

8. Несобственное вращение, количество операций несобственного вращения при нечетном и четном порядке оси поворота. 9. Инверсия, преобразование координат при операции инверсии.

#### Тема 6. Редукция приводимых представлений

контрольная работа , примерные вопросы:

10. Тожественное преобразование (операция идентичности), формальный и содержательный смысл операции идентичности. 11. Определение точечной группы.

### **Тема 7. Неприводимые представления и классификация термов**

устный опрос , примерные вопросы:

12. Системы обозначений точечных групп Шенфлиса и Германа-Могена (международная). 13. Точечные группы -  $C_1, C_s, C_i$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах.

### **Тема 8. Термы многоэлектронных состояний**

контрольная работа , примерные вопросы:

14. Циклические группы -  $C_n, S_n, C_{nv}, C_{nh}$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах. 15. Диэдрические группы -  $D_n, D_{nh}, D_{nd}$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах.

### **Тема 9. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем**

устный опрос , примерные вопросы:

16. Кубические группы  $T_d, T_h, T; O_h, O; I_h, I$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах. 17. Правильные многогранники (тела Платона).

### **Тема 10. Правила отбора для матричных элементов**

контрольная работа , примерные вопросы:

18. Особенности непрерывных точечных групп  $C_{\infty v}, D_{\infty h}$  и  $Rh(3)$ . 19. Параметрические группы Ли.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету и контрольным работам

1. Понятие симметрии в философии и естествознании.
2. Дедуктивно-аксиоматический метод в теории симметрии.
3. Геометрический подход к теории симметрии.
4. Определение точечной симметрии.
5. Операции и элементы симметрии.
6. Собственное вращение вокруг оси симметрии, порядок оси вращения.
6. Правила ориентации молекул относительно системы координат.
7. Отражение в плоскости симметрии, преобразование координат при отражении в плоско-сти симметрии.
8. Несобственное вращение, количество операций несобственного вращения при нечетном и четном порядке оси поворота.
9. Инверсия, преобразование координат при операции инверсии.
10. Тожественное преобразование (операция идентичности), формальный и содержательный смысл операции идентичности.
11. Определение точечной группы.
12. Системы обозначений точечных групп Шенфлиса и Германа-Могена (международная).
13. Точечные группы -  $C_1, C_s, C_i$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах.
14. Циклические группы -  $C_n, S_n, C_{nv}, C_{nh}$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах.
15. Диэдрические группы -  $D_n, D_{nh}, D_{nd}$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах.
16. Кубические группы  $T_d, T_h, T; O_h, O; I_h, I$ . Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах.



17. Правильные многогранники (тела Платона).
18. Особенности непрерывных точечных групп  $C_{\infty v}$ ,  $D_{\infty h}$  и  $Rh(3)$ .
19. Параметрические группы Ли.
20. Алгоритм определения точечной группы симметрии молекул.
21. Применение алгоритма определения точечной группы симметрии молекул к отнесению симметрии сэндвичевых комплексных соединений.
22. Строгий критерий оптической активности молекул, группы симметрии оптически активных молекул -  $C_1$ ,  $C_n$  и  $D_n$ .
23. Оптическая активность комплексов.
24. Группы симметрии молекул, обладающих дипольным моментом -  $C_1$ ,  $CS$ ,  $C_n$ ,  $C_{nv}$  и  $C_{\infty v}$ .
25. Эквивалентные атомы.
26. Примеры отнесения симметрии молекул на основе определения числа эквивалентных атомов спектральными методами:  $[VOF_5]^{3-}$ ,  $[Ni(CN)_5]^{3-}$ ,  $[Mo(CN)_8]^{3-}$ ,  $NiL_4$ .
27. Стереохимически нежесткие структуры комплексов.
28. Принцип относительности к средствам наблюдения.
29. Изохронность, диастереотопия и прохиральность (на примерах соединений:  $H_3C-CH_2Cl$ ,  $ABDC-CH_2Cl$  и  $(CH_3)_2CH-CH(NH_2)COOH$ ).
30. Алгебраический подход к теории симметрии.
31. Композиция (произведение) операций симметрии.
32. Группы с коммутирующими операциями (абелевы) и некоммутирующими операциями (неабелевы).
33. Примеры произведения операций в группах  $C_{2v}$  (молекула  $H_2O$ ) и  $D_{3h}$  (молекула  $BF_3$ ).
34. Математическое определение группы.
35. Четыре основных свойства математической группы.
36. Примеры групп. Таблица умножения для группы. Свойства таблицы умножения для группы.
37. Построение таблицы умножения для абстрактной группы из трех элементов -  $E$ ,  $A$  и  $B$ .
38. Подгруппы, циклические группы.
39. Преобразование подобия (операция сопряжения).
40. Три свойства операции сопряжения.
41. Классы сопряженных элементов. Классификация элементов группы  $C_{3v}$ .
42. Генераторы группы.
43. Пример построения группы  $C_{3v}$  на основе генераторов  $C_3$  и  $\sigma_v$ .
44. Прямые и полупрямые произведения групп. Пример построения группы  $C_{3v}$  на основе подгрупп  $C_3$  и  $CS$ .
45. Правые и левые смежные классы элементов.
46. Инвариантные подгруппы.
47. Таблица иерархии точечных групп, записанных через генераторы и произведения независимых подгрупп.
48. Формально-математический аппарат теории симметрии.
49. Определение тензора как упорядоченной системы функций от координат точки.
50. Ранг тензора.
51. Операции над векторами: 1) сложение; 2) умножение на скаляр; 3) скалярное произведение векторов; 4) тензорное (прямое) произведение векторов.
52. Базисные векторы. Вектор-столбец, вектор-строка, транспонированный и обратный вектор. Операции над матрицами: 1) сложение; 2) умножение матрицы на скаляр; 3) скалярное произведение матриц; 4) тензорное (прямое) произведение матриц.
53. Характер (след) матрицы.

54. Квадратные, единичные и обратные матрицы, транспонированные, эрмитово-сопряженные и унитарные матрицы.
55. Обозначение единичной матрицы символом Кронекера.
56. Преобразование подобия для матриц. Пример преобразования подобия с помощью векторов и матриц при повороте системы координат.
57. Матрицы преобразований для операций симметрии.
58. Матрица поворота в трехмерном пространстве, унитарность матрицы поворота.
59. Матрицы преобразований для всех введенных генераторов точечных групп симметрии.
60. Отображения, изо- и гомоморфизм.
61. Определение представления группы.
62. Определение неприводимого представления группы.
63. Три главных свойства неприводимых представлений.
64. Таблицы характеров групп.
65. Неприводимые представления групп  $C_2$  и  $C_3$ .
66. Разделимо-вырожденные комплексно-сопряженные представления и их базисные функции.
67. Неприводимые представления группы  $C_{2v}$ .
68. Определение произведения неприводимых представлений (с примером для группы  $C_{2v}$ ).
69. Задание неприводимых представлений в пространстве ортогональных функций.
70. Таблицы Кэли.
71. Размерность неприводимых представлений в различных точечных группах и их обозначение.
72. Физический смысл неприводимых представлений на примере молекулы воды.
73. Преобразование векторов трансляции и компонент вектора углового момента при операциях симметрии группы  $C_{2v}$ .
74. Способы систематического построения таблиц характеров на основе генераторов групп и произведения подгрупп (примеры построения таблиц для групп  $C_{2v}$  и  $C_{3v}$ ).
75. Таблицы характеров точечных групп и обозначения представлений.
76. Краткий вариант таблиц характеров неприводимых представлений.
77. Построение неприводимых представлений группы  $D_{3d}$  на основе произведения подгрупп  $D_3$  и  $C_i$ .
78. Способы редукции приводимых представлений.
79. Векторы-строки неприводимых представлений как множество взаимно-ортогональных функций.
80. Формула разложения, кратность вхождения неприводимого представления в приводимое.
81. Редукция произведения неприводимых представлений  $E_1 \times E_2$  группы  $D_6$  методом подбора и по формуле разложения.
82. Редукции произведений неприводимых представлений точечных групп с помощью правил изменения обозначений Малликена.
83. Матрицы преобразований и неприводимые представления групп симметрии  $R(3)$  и  $Rh(3)$ .
84. Матрица поворота произвольного порядка и ее базисные функции (однородные ортогональные полиномы, присоединенные полиномы Лежандра).
85. Произведения неприводимых представлений групп  $R(3)$  и  $Rh(3)$ , формула Клебша-Гордана.
86. Теорема Э.П. Вигнера.
87. Квантовая механика как физическая интерпретация теории симметрии (теории групп).
88. Классификация термов свободного атома, физический смысл неприводимых представлений группы  $Rh(3)$  и обозначения их базисных функций.
89. Аспекты симметрии в теории кристаллического поля.

90. Редукция представлений  $D_u(1)$  и  $D_g(2)$  группы  $R_h(3)$  в кристаллических полях симметрии  $T_d$ ,  $O$  и  $O_h$ .
91. Редукция неприводимого представления  $T_2 (F_2)$  группы  $T_d$  к неприводимым представлениям групп  $C_{3v}$  и  $C_{2v}$ .
92. Корреляционные таблицы. Расщепление одноэлектронных d-орбиталей в кристаллических полях различной симметрии.
93. Принципы инверсии энергетических уровней для октаэдрического и тетраэдрического полей и для дополнительных конфигураций  $dn$  и  $d^{10-n}$ .
94. Неприводимые представления групп  $C_{\infty v}$ ,  $D_{\infty h}$  и термы линейных молекул, обозначения неприводимых представлений и их базисных функций, заимствованные из атомной спектроскопии.
95. Концепция  $\sigma$ -,  $\pi$ -,  $\delta$ - и других молекулярных орбиталей.
96. Термы многоэлектронных состояний линейных молекул: выражение полной молекулярной волновой функции (и ее представления) в виде произведения одноэлектронных волновых функций (и их неприводимых представлений).
97. Разложение представления полной молекулярной волновой функции в случае замкнутых и открытых электронных оболочек; примеры термов молекул  $H_2$  и  $O_2$ .
98. Атомные термы многоэлектронных состояний.
99. Учет в полной группе симметрии атома группы перестановок  $S(n)$ , принцип Паули.
100. Межэлектронное отталкивание и спин-орбитальное взаимодействие при LS- и jj-связи.
101. Расщепление термов под действием межэлектронного отталкивания, обозначения атомных термов и принципы определения их мультиплетности.
102. Терм конфигурации  $d^1$ . Расщепление под действием спин-орбитального взаимодействия атомных термов с целочисленными значениями  $J$ .
103. Термы конфигурации  $d^2$ . Расщепление атомных термов с полуцелыми значениями  $J$ .
104. Двойные группы и двузначные представления. Термы конфигураций  $d^3$  и  $d^7$ .
105. Расщепление термов конфигурации  $d^2$  (целочисленные  $J$ ) в слабом и сильном кристаллических полях симметрии  $O_h$ .
106. Определение спиновой мультиплетности состояний методом снижения симметрии.
107. Принципы корреляции термов слабого и сильного кристаллических полей.
108. Диаграммы Танабе-Сугано (пример для конфигурации  $d^5$ ).
109. Расщепление термов конфигурации  $d^7$  (полуцелые  $J$ ) в слабом и сильном октаэдрических полях.
110. Расщепление атомных термов в случае jj-связи.
111. Электронные спектры комплексов переходных d-металлов.
112. Построение диаграмм Оргела для случаев D- и F-термов основного состояния в слабых кристаллических полях симметрии  $O_h$  и  $T_d$  с учетом трех принципов.
113. Правила отбора для матричных элементов (ограничения по симметрии на квантово-механические интегралы).
114. Интенсивность электронных переходов.
115. Правила отбора для матричного элемента оператора дипольного момента (момента перехода,  $P$ ).
116. Источники интенсивности запрещенных переходов.
117. Отнесение электронных переходов в спектрах поляризованного излучения (на примере монокристаллов комплексов  $K[Cu(NH_3)_5](PF_6)_3$  симметрии  $C_{4v}$  и  $K[Cu(NH_3)_2(NCS)_3]$  симметрии  $D_{3h}$ ).
118. Классификация колебаний по типам симметрии.
119. Представление матрицы преобразований координат атомов при операциях симметрии на примере молекулы воды ( $C_{2v}$ ), его разложение на представления трансляций, вращений и колебаний.

120. Правила отбора для поглощения излучения молекулярными колебаниями в ИК-спектре и КР-спектре (вектор индуцированного дипольного момента  $D$ , тензор поляризуемости  $\alpha$  и неприводимые представления его компонент).

121. Определение типа симметрии и числа колебаний, активных в ИК- и КР-спектрах

### 7.1. Основная литература:

1. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения.- М.: Мир, 1983.- 400 с.
2. Джаффе Г. Симметрия в химии / Г. Джаффе, М. Орчин. - М.: Мир, 1967. - 234 с.
3. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. - М.: Мир, 1968. - 384 с.
4. Драго Р. Физические методы в химии. В 2-х т. - М.: Мир, 1981.- Т. 1.- 422 с., Т. 2.- 456 с.
5. Вейль Герман. Симметрия. - М: Наука, Гл. ред. Физ.-мат. лит., 1968. - 192 с.
6. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия, 1986. - 288 с.
7. Ливер Э. Электронная спектроскопия неорганических соединений. В 2-х т. - М.: Мир, 1987. - Т. 1. - 493 с., Т. 2. - 445 с.
8. Артамонов В.А. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии / В.А. Артамонов, Ю.Л. Словохотов. - М.: ИЦ "Академия", 2005. - 512 с.

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Вигнер Е. Теория групп и ее приложение к квантовохимической теории атомных спектров. - М.: ИЛ, 1961.
2. Ландау Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Т.3 / Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - М.: Наука, 1989.
3. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. - М.: ИЛ, 1949.
4. Герцберг Г. Колебательные спектры многоатомных молекул. - М.: ИЛ, 1949.
5. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. - М.: ИЛ, 1964.
6. Накамото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. - М.: Мир, 1966.
7. Коттон Ф.А. Химические приложения теории групп. - М.: Мир, 1965.
8. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
9. Берсукер И.Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. - М.: Наука, 1987.
10. Киперт Д. Неорганическая стереохимия. - М.: Мир, 1985.
11. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т.1-3. - М.: Мир, 1987-1988.
12. Банкер Ф. Симметрия молекул и спектроскопия. 2-е перераб. изд. / Ф. Банкер, П. Йенсен. - М.: Мир, Научный мир, 2004.
13. Харгиттаи И. Симметрия глазами химика / И. Харгиттаи, М. Харгиттаи. - М.: Мир, 1989.
14. Cotton F.A. Chemical Applications of Group Theory. Third Ed. - New York e.a.: Wiley, 1990.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

БЭС - <http://slovari.yandex.ru/~книги/БСЭ/Симметрия%20кристаллов/>

российская информационная сеть - [www.chem.msu.ru](http://www.chem.msu.ru)

Точечные группы симметрии - [menu/about/kafs/13.pdf](http://menu/about/kafs/13.pdf)

Электронная библиотека - [www.rushim.ru](http://www.rushim.ru)

энциклопедия физики и техники - [http://femto.com.ua/articles/part\\_2/3634.html](http://femto.com.ua/articles/part_2/3634.html)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Освоение дисциплины "Теория симметрии в координационной химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе "Нефтехимия и катализ".

Автор(ы):

Штырлин В.Г. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Соломонов Б.Н. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

## Лист согласования

<b>N</b>	<b>ФИО</b>	<b>Согласование</b>
1	Соломонов Б. Н.	Согласовано
2	Бычкова Т. И.	Согласовано
3	Чижанова Е. А.	Согласовано с замечаниями Литература отвечает требованиям по обеспеченности, но не соответствует критериям новизны. В НБ есть следующее издание:Пентин, Юрий Андреевич. Физические методы исследования в химии: учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности 011000 "Химия" и направлению подготовки 510500 "Химия" / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. ?Москва: Мир, [2012].?683 с., [1] л - 10 экз.
4	Соколова Е. А.	
5	Тимофеева О. А.	