

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Е.А. Турилова

17 февраля 2023 г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Теория симметрии в координационной химии

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Фундаментальная химия: материалы будущего

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Valery.Shtyrlin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

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, редукцию приводимых представлений по симметрии и классификацию термов атомов и молекул, правила отбора для матричных элементов, симметрические группы перестановок, диаграммы Юнга, симметрические группы перестановок с инверсией, сайт-симметрию, проекционные операторы, конфигурационное взаимодействие, неприводимые представления ядерных спиновых состояний, аспекты симметрии в механизмах химических реакций, вибронные и ровибронные эффекты и их роль в химических реакциях.

Должен уметь:

ориентироваться в таблицах характеров групп, аспектах симметрии в теории кристаллического поля, корреляционных таблицах, термах многоэлектронных состояний, оценивать роль межэлектронного отталкивания и спин-орбитального взаимодействия при LS- и jj-связи, применять супергруппу Шредингера, оценивать связывание спинов ядер по Клебшу-Гордану, находить неприводимые представления ядерных спиновых состояний, оценивать сверхтонкое расщепление в спектрах ЭПР.

Должен владеть:

навыками применения понятий теории симметрии к анализу оптической активности, дипольных моментов, стереохимически нежестких структур, эквивалентных атомов и диастереотопии, электронных, ИК- и КР-спектров, к отнесению электронных переходов в спектрах поляризованного излучения, групп симметрии нежестких молекул, к анализу электронной структуры молекул, вращательных состояний, спектров ЯМР и ЭПР, симметрии в механизмах химических реакций.

Должен демонстрировать способность и готовность:

применения понятий теории симметрии к анализу оптической активности, дипольных моментов, стереохимически нежестких структур, эквивалентных атомов и диастереотопии, электронных, ИК- и КР-спектров, к отнесению электронных переходов в спектрах поляризованного излучения, групп симметрии нежестких молекул, к анализу электронной структуры молекул, вращательных состояний, спектров ЯМР и ЭПР, симметрии в механизмах химических реакций.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.15.04 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия (Фундаментальная химия: материалы будущего)" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 4 курсе в 8 семестре.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 40 часа(ов), в том числе лекции - 40 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 32 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 8 семестре.

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

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Понятие симметрии в философии и естествознании. Геометрический подход к теории симметрии. Точечная симметрия.	8	2	2	0	0	0	0	2
2.	Тема 2. Понятие о точечных группах симметрии. Системы обозначений точечных групп. Четыре типа точечных групп. Особенности непрерывных точечных групп.	8	2	2	0	0	0	0	2
3.	Тема 3. Алгоритм определения точечной группы симметрии молекул. Критерии наличия оптической активности и дипольного момента. Эквивалентные атомы. Стереохимически нежесткие структуры комплексов. Диастереотопия.	8	2	2	0	0	0	0	2
4.	Тема 4. Антисимметрия. Симметрия и диссимметрия в природе и искусстве. Решение задач с применением геометрического подхода к теории симметрии.	8	2	2	0	0	0	0	2
5.	Тема 5. Алгебраический подход к теории симметрии. Основные свойства математической группы. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы. Преобразование подобия. Классы сопряженных элементов.	8	2	2	0	0	0	0	2
6.	Тема 6. Генераторы группы. Произведения групп. Операции над векторами. Операции над матрицами. Квадратные, единичные, обратные, транспонированные, эрмитово-сопряженные и унитарные матрицы.	8	2	2	0	0	0	0	2
7.	Тема 7. Преобразование подобия для матриц. Матрицы преобразований для операций симметрии. Отображения, изо- и гомоморфизм. Неприводимые представления и их основные свойства. Таблицы характеров групп.	8	2	0	0	0	0	0	2

N	Разделы дисциплины / модуля	Се- местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само- стоя- тель- ная ра- бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи- ческие занятия, всего	Практи- ческие в эл. форме	Лабора- торные работы, всего	Лабора- торные в эл. форме	
8.	Тема 8. Произведения неприводимых представлений. Таблицы Кэли. Физический смысл неприводимых представлений. Способы систематического построения таблиц характеров. Таблицы характеров точечных групп и обозначения представлений по Малликену.	8	2	0	0	0	0	0	2
9.	Тема 9. Редукция приводимых представлений. Формула разложения. Редукция произведения неприводимых представлений. Формула Клебша-Гордана.	8	2	0	0	0	0	0	2
10.	Тема 10. Неприводимые представления и классификация термов. Теорема Э.П. Вигнера. Классификация термов свободного атома. Аспекты симметрии в теории кристаллического поля. Корреляционные таблицы.	8	2	0	0	0	0	0	2
11.	Тема 11. Термы многоэлектронных состояний. Неприводимые представления и термы линейных молекул. Межэлектронное отталкивание и спин-орбитальное взаимодействие при LS- и jj-связи. Атомные термы. Расщепление термов под действием спин-орбитального взаимодействия. Двойные группы и двузначные представления.	8	2	0	0	0	0	0	2
12.	Тема 12. Расщепление термов в слабом и сильном кристаллических полях симметрии Oh. Определение спиновой мультиплетности состояний методом снижения симметрии. Диаграммы Танабе-Сугано. Электронные спектры комплексов переходных d-металлов. Диаграммы Оргела.	8	2	0	0	0	0	0	2
13.	Тема 13. Правила отбора для матричных элементов. Интенсивность электронных переходов. Источники интенсивности запрещенных переходов. Отнесение электронных переходов в спектрах поляризованного излучения.	8	2	0	0	0	0	0	2
14.	Тема 14. Классификация колебаний по типам симметрии. Правила отбора для поглощения излучения молекулярными колебаниями. Решение задач с применением алгебраического подхода к теории симметрии.	8	2	0	0	0	0	0	2

N	Разделы дисциплины / модуля	Се- местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само- стоя- тель- ная рабо- та
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи- ческие занятия, всего	Практи- ческие в эл. форме	Лабора- торные работы, всего	Лабора- торные в эл. форме	
15.	Тема 15. Некоторые специальные группы. Симметрическая группа перестановок. Диаграммы Юнга. Симметрические группы перестановок с инверсией. Группы симметрии нежестких молекул. Изодинамические операции. Супергруппа Шредингера.	8	2	0	0	0	0	0	2
16.	Тема 16. Квантовая механика и электронная структура молекул. Метод МО ЛКАО. Сайт-симметрия и симметрия МО. Гибридные орбитали. Проекционные операторы и МО ЛКАО. Волновые функции метода ВС. Конфигурационное взаимодействие.	8	4	0	0	0	0	0	2
17.	Тема 17. Вращательные и ядерные спиновые состояния. Интенсивность вращательных переходов. Связывание спинов ядер по Клебшу-Гордану. Неприводимые представления ядерных спиновых состояний и спектры ЯМР. Сверхтонкое расщепление в спектрах ЭПР.	8	4	0	0	0	0	0	0
18.	Тема 18. Аспекты симметрии в механизмах химических реакций. Электроциклические реакции. Реакции циклоприсоединения. Реакции перегруппировки и элиминирования. Структурная нежесткость, вибронные и ровибронные эффекты и их роль в химических реакциях.	8	2	0	0	0	0	0	0
Итого			40	12	0	0	0	0	32

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Понятие симметрии в философии и естествознании. Геометрический подход к теории симметрии. Точечная симметрия.

Понятие симметрии в философии и естествознании. Дедуктивно-аксиоматический метод в теории симметрии. Геометрический подход к теории симметрии. Определение точечной симметрии. Операции и элементы симметрии. Собственное вращение вокруг оси симметрии, по-рядок оси вращения. Правила ориентации молекул относительно системы координат. Отражение в плоскости симметрии, преобразование координат при отражении в плоскости симметрии. Несобственное вращение, количество операций несобственного вращения при нечетном и четном порядке оси поворота. Инверсия, преобразование координат при операции инверсии. Тождественное преобразование (операция идентичности), формальный и содержательный смысл операции идентичности.

Тема 2. Понятие о точечных группах симметрии. Системы обозначений точечных групп. Четыре типа точечных групп. Особенности непрерывных точечных групп.

Определение точечной группы. Системы обозначений точечных групп Шенфлиса и Германа-Могена (международная). Четыре типа точечных групп: 1) простейшие группы - C_1, C_s, C_i ; 2) циклические группы - $C_n, C_{2n}, C_{nv}, C_{nh}$; 3) диэдрические группы - D_n, D_{nh}, D_{nd} ; 4) T_d, T_h, T, O_h, O (кубические группы); I_h, I . Правильные многогранники (тела Платона). Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах. Архимедовы и каталановы тела. Особенности непрерывных точечных групп $C_{\infty v}, D_{\infty h}$ и $Rh(3)$. Параметрические группы Ли.

Тема 3. Алгоритм определения точечной группы симметрии молекул. Критерии наличия оптической активности и дипольного момента. Эквивалентные атомы. Стереохимически нежесткие структуры комплексов. Диастереотопия.

Алгоритм определения точечной группы симметрии молекул, применение алгоритма к отнесению симметрии сэндвичевых комплексных соединений. Строгий критерий оптической активности молекул, группы симметрии оптически активных молекул - C_1 , C_n , D_n , O , I , $R(3)$. Оптическая активность комплексов. Группы симметрии молекул, обладающих дипольным моментом - C_1 , CS , C_n , C_{nv} и $C_{\infty v}$. Эквивалентные атомы. 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 . Стереохимически нежесткие структуры комплексов. Принцип относительности к средствам наблюдения. Изохронность, диастереотопия и прохиральность (на примерах соединений: H_3C-CH_2Cl , $ABDC-CH_2Cl$ и $(CH_3)_2CH-CH(NH_2)COOH$).

Тема 4. Антисимметрия. Симметрия и диссимметрия в природе и искусстве. Решение задач с применением геометрического подхода к теории симметрии.

Определение точечной группы по системам Шенфлиса и Германа-Могена, наличия оптической активности, дипольного момента и числа неэквивалентных атомов у различных молекул на основе введенных алгоритмов. Анализ симметрии и физико-химических свойств молекул искаженной тетраэдрической и октаэдрической симметрии. Рассмотрение симметрии и физико-химических свойств конформеров. Понятие обобщенной симметрии. Операция антисимметрии. Группы антисимметрии (магнитные или шубниковские группы). Примеры точечных групп антисимметрии: $1?$, $2?/m?$, $4?$, $32?$. Цветные (беловские) группы.

Тема 5. Алгебраический подход к теории симметрии. Основные свойства математической группы. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы. Преобразование подобия. Классы сопряженных элементов.

Алгебраический подход к теории симметрии. Композиция (произведение) операций симметрии. Группы с коммутирующими операциями (абелевы) и некоммутирующими операциями (неабелевы). Примеры произведения операций в группах C_{2v} (молекула H_2O) и D_{3h} (молекула BF_3). Математическое определение группы. Из истории становления теории групп (Э. Галуа, К. Жордан, Ф. Клейн, С. Ли). Четыре основных свойства математической группы: 1) композиция любых двух элементов группы дает элемент, также принадлежащий данной группе (условие замкнутости); 2) для любых элементов группы выполняется ассоциативный закон (групповые свойства); 3) существует единственный единичный элемент (E), коммутирующий с любым другим элементом группы и дающий в произведении с ним этот же элемент; 4) для каждого элемента группы (A) существует обратный ему элемент (A^{-1}), коммутирующий с ним и дающий в произведении с ним единичный элемент. Примеры групп. Таблица умножения для группы. Свойства таблицы умножения для группы. Построение таблицы умножения для абстрактной группы из трех элементов - E , A и B . Подгруппы, циклические группы. Преобразование подобия (операция сопряжения). Три свойства операции сопряжения: 1) каждый элемент группы сопряжен сам с собой; 2) если элемент A сопряжен с элементом B , то и B сопряжен с A ; 3) если элемент A сопряжен с элементами B и C , то B и C сопряжены между собой. Классы сопряженных элементов. Классификация элементов группы C_{3v} .

Тема 6. Генераторы группы. Произведения групп. Операции над векторами. Операции над матрицами. Квадратные, единичные, обратные, транспонированные, эрмитово-сопряженные и унитарные матрицы.

Генераторы группы. Пример построения группы C_{3v} на основе генераторов C_3 и σ_v . Прямые и полупрямые произведения групп. Пример построения группы C_{3v} на основе подгрупп C_3 и CS . Правые и левые смежные классы элементов. Инвариантные подгруппы. Таблица иерархии точечных групп, записанных через генераторы и произведения независимых подгрупп. Формально-математический аппарат теории симметрии. Определение тензора как упорядоченной системы функций от координат точки. Ранг тензора. Операции над векторами: 1) сложение; 2) умножение на скаляр; 3) скалярное произведение векторов; 4) тензорное (прямое) произведение векторов. 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. Характер (след) матрицы. Квадратные, единичные и обратные матрицы, транспонированные, эрмитово-сопряженные и унитарные матрицы. Обозначение единичной матрицы символом Кронекера.

Тема 7. Преобразование подобия для матриц. Матрицы преобразований для операций симметрии. Отображения, изо- и гомоморфизм. Неприводимые представления и их основные свойства. Таблицы характеров групп.

Преобразование подобия для матриц. Пример преобразования подобия с помощью векторов и матриц при повороте системы координат. Матрицы преобразований для операций симметрии. Матрица поворота в трехмерном пространстве, унитарность матрицы поворота. Матрицы преобразований для всех введенных генераторов точечных групп симметрии. Отображения, изо- и гомоморфизм. Определение представления группы. Определение неприводимого представления группы. Три главных свойства неприводимых представлений: 1) число неприводимых представлений группы равно числу ее классов; 2) сумма квадратов размерностей неприводимых представлений равна порядку группы; 3) если неприводимые представления группы одномерны, то они сами образуют группу. Таблицы характеров групп. Неприводимые представления групп C_2 и C_3 . Разделимо-вырожденные комплексно-сопряженные представления и их базисные функции.

Тема 8. Произведения неприводимых представлений. Таблицы Кэли. Физический смысл неприводимых представлений. Способы систематического построения таблиц характеров. Таблицы характеров точечных групп и обозначения представлений по Малликену.

Неприводимые представления группы C_{2v} . Определение произведения неприводимых представлений (с примером для группы C_{2v}). Задание неприводимых представлений в пространстве ортогональных функций. Таблицы Кэли. Размерность неприводимых представлений в различных точечных группах и их обозначение. Физический смысл неприводимых представлений на примере молекулы воды. Преобразование векторов трансляции и компонент вектора углового момента при операциях симметрии группы C_{2v} . Способы систематического построения таблиц характеров на основе генераторов групп и произведения подгрупп (примеры построения таблиц для групп C_{2v} и C_{3v}). Таблицы характеров точечных групп и обозначения представлений. Краткий вариант таблиц характеров неприводимых представлений (из курса Ландау-Лифшица). Построение неприводимых представлений группы D_{3d} на основе произведения подгрупп D_3 и C_i .

Тема 9. Редукция приводимых представлений. Формула разложения. Редукция произведения неприводимых представлений. Формула Клебша-Гордана.

Способы редукции приводимых представлений. Векторы-строки неприводимых представлений как множество взаимно-ортогональных функций. Формула разложения, кратность вхождения неприводимого представления в приводимое. Редукция произведения неприводимых представлений $E_1 \times E_2$ группы D_6 методом подбора и по формуле разложения. Редукции произведений неприводимых представлений точечных групп с помощью правил изменения обозначений Малликена. Матрицы преобразований и неприводимые представления групп симметрии $R(3)$ и $Rh(3)$. Матрица поворота произвольного порядка и ее базисные функции (однородные ортогональные полиномы, присоединенные полиномы Лежандра). Произведения неприводимых представлений групп $R(3)$ и $Rh(3)$, формула Клебша-Гордана.

Тема 10. Неприводимые представления и классификация термов. Теорема Э.П. Вигнера. Классификация термов свободного атома. Аспекты симметрии в теории кристаллического поля. Корреляционные таблицы.

Теорема Э.П. Вигнера: решения уравнения Шредингера определяют множество неприводимых представлений в пространстве функций, заданных этими решениями. Квантовая механика как физическая интерпретация теории симметрии (теории групп). Классификация термов свободного атома, физический смысл неприводимых представлений группы $Rh(3)$ и обозначения их базисных функций. Аспекты симметрии в теории кристаллического поля. Редукция представлений T_2 (F_2) группы $Rh(3)$ в кристаллических полях симметрии T_d , O и O_h . Редукция неприводимого представления T_2 (F_2) группы T_d к неприводимым представлениям групп C_{3v} и C_{2v} . Корреляционные таблицы. Расщепление одноэлектронных d-орбиталей в кристаллических полях различной симметрии. Принципы инверсии энергетических уровней для октаэдрического и тетраэдрического полей и для дополнительных конфигураций dn и $d10-n$.

Тема 11. Термы многоэлектронных состояний. Неприводимые представления и термы линейных молекул. Межэлектронное отталкивание и спин-орбитальное взаимодействие при LS- и jj-связи. Атомные термы. Расщепление термов под действием спин-орбитального взаимодействия. Двойные группы и двузначные представления.

Неприводимые представления групп C_{2v} , D_{2h} и термы линейных молекул, обозначения неприводимых представлений и их базисных функций, заимствованные из атомной спектроскопии. Концепция σ -, π -, δ - и других молекулярных орбиталей. Термы многоэлектронных состояний линейных молекул: выражение полной молекулярной волновой функции (и ее представления) в виде произведения одноэлектронных волновых функций (и их неприводимых представлений); разложение представления полной молекулярной волновой функции в случае замкнутых и открытых электронных оболочек; примеры термов молекул N_2 и O_2 . Атомные термы многоэлектронных состояний. Учет в полной группе симметрии атома группы перестановок $S(n)$, принцип Паули. Межэлектронное отталкивание и спин-орбитальное взаимодействие при LS- и jj-связи. Расщепление термов под действием межэлектронного отталкивания, обозначения атомных термов и принципы определения их мультиплетности. Терм конфигурации $d1$. Расщепление под действием спин-орбитального взаимодействия атомных термов с целочисленными значениями J . Термы конфигурации $d2$. Расщепление атомных термов с полуцелыми значениями J . Двойные группы и двузначные представления. Термы конфигураций $d3$ и $d7$.

Тема 12. Расщепление термов в слабом и сильном кристаллических полях симметрии O_h . Определение спиновой мультиплетности состояний методом снижения симметрии. Диаграммы Танабе-Сугано. Электронные спектры комплексов переходных d-металлов. Диаграммы Оргела.

Расщепление термов конфигурации d^2 (целочисленные J) в слабом и сильном кристаллических полях симметрии O_h . Определение спиновой мультиплетности состояний методом снижения симметрии. Принципы корреляции термов слабого и сильного кристаллических полей: 1) все состояния слабого поля коррелируют с состояниями сильного поля той же симметрии и той же мультиплетности; 2) с изменением силы кристаллического поля состояния с одинаковой симметрией и мультиплетностью не пересекаются. Диаграммы Танабе-Сугано (пример для конфигурации d^5). Расщепление термов конфигурации d^7 (полуцелые J) в слабом и сильном октаэдрических полях. Расщепление атомных термов в случае jj -связи. Электронные спектры комплексов переходных d -металлов. Построение диаграмм Орбела для случаев D - и F -термов основного состояния в слабых кристаллических полях симметрии O_h и T_d с учетом трех принципов: 1) инвертирование энергетических уровней в полях симметрии T_d по отношению к O_h ; 2) инвертирование энергетических уровней дополнительных конфигураций dn и d_{10-n} ; 3) идентичность высокоспиновых состояний для конфигураций dn и $dn+5$. Диаграмма Орбела для конфигурации d^5 .

Тема 13. Правила отбора для матричных элементов. Интенсивность электронных переходов. Источники интенсивности запрещенных переходов. Отнесение электронных переходов в спектрах поляризованного излучения.

Правила отбора для матричных элементов (ограничения по симметрии на квантово-механические интегралы): матричный элемент отличен от нуля только тогда, когда его представление содержит полносимметричное неприводимое представление (A, A_1, A_1g). Интенсивность электронных переходов. Правила отбора для матричного элемента оператора дипольного момента (момента перехода, P): 1) переходы между состояниями с одинаковой четностью запрещены (правило Лапорта); 2) переходы между состояниями с разными спиновыми мультиплетностями запрещены; 3) переходы с возбуждением двух и более электронов запрещены. Источники интенсивности запрещенных переходов: 1) спин-орбитальное взаимодействие; 2) смешивание орбиталей разной четности при некоторых симметриях (пример тетраэдрических комплексов кобальта(II)); 3) электронно-ядерное (вибронное) взаимодействие. 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}).

Тема 14. Классификация колебаний по типам симметрии. Правила отбора для поглощения излучения молекулярными колебаниями. Решение задач с применением алгебраического подхода к теории симметрии.

Классификация колебаний по типам симметрии. Нормальные колебания. Представление матрицы преобразований координат атомов при операциях симметрии на примере молекулы воды (точечная группа симметрии C_{2v}), его разложение на представления трансляций, вращений и колебаний. Неприводимые представления нормальных колебаний молекулы формальдегида (точечная группа симметрии C_{2v}). Использование сайт-симметрии для нахождения нормальных колебательных мод. Применение проекционных операторов для анализа нормальных колебательных мод. Валентные и деформационные колебания. Правила отбора для поглощения излучения молекулярными колебаниями. Определение типа симметрии и числа колебаний, активных в ИК-спектрах, на примерах рассмотренных молекул. Основные полосы и обертоны. Определение типа симметрии и числа колебаний, активных в КР-спектрах, на примерах рассмотренных молекул. Вектор индуцированного дипольного момента D , тензор поляризуемости α и неприводимые представления его компонент. Определение типов нормальных колебаний нитрат-иона (точечная группа симметрии D_{3h}), ответственных за появление перехода $A_1' \rightarrow A_1''$ ($n\ell^*$) в спектре электрического дипольного излучения.

Тема 15. Некоторые специальные группы. Симметрическая группа перестановок. Диаграммы Юнга. Симметрические группы перестановок с инверсией. Группы симметрии нежестких молекул. Изодинамические операции. Супергруппа Шредингера.

Симметрическая группа перестановок. Циклические перестановки. Обозначения перестановок. Классы сопряженных элементов симметрической группы перестановок. Неприводимые представления симметрической группы перестановок. Диаграммы Юнга. Хук-диаграммы. Неприводимые представления симметрической группы $S(4)$. Изоморфизм групп $S(4)$ и T_d . Симметрические группы перестановок с инверсией (группы Лонге-Хиггинса) $S^*(n)$. Изоморфизм групп $S^*(3)$, $S(6)$ и D_{3d} на примере заторможенной конформации молекулы этана. Группы симметрии нежестких молекул. Изодинамические операции. Рассмотрение изодинамических операций на примере молекулы этана. Супергруппа Шредингера. Рассмотрение супергрупп Шредингера на примере молекул аммиака, метанола и пропана. Таблица произведений супергруппы пропана. Таблица характеров супергруппы пропана.

Тема 16. Квантовая механика и электронная структура молекул. Метод МО ЛКАО. Сайт-симметрия и симметрия МО. Гибридные орбитали. Проекционные операторы и МО ЛКАО. Волновые функции метода ВС. Конфигурационное взаимодействие.

Молекулярные орбитали как ЛКАО. Симметрия орбиталей двухатомных молекул (точечные группы $D_{\infty h}$ или $C_{\infty v}$). Симметрия молекулярных орбиталей на примере молекулы этилена (точечная группа D_{2h}). Геометрический вывод представлений молекулярных орбиталей на примере группы D_{2h} . Сайт-симметрия и симметрия МО. Определение симметрии возможных молекулярных орбиталей тетраэдрической аммиака с помощью сайт-симметрии. Определение симметрии возможных молекулярных орбиталей тетраэдрической молекулы с помощью сайт-симметрии. Гибридные орбитали. Группы сайт-симметрии и группы перестановок для молекул. Описание гибридизации в тригонально-пирамидальных молекулах (точечная группа симметрии C_{3v}). Проекционные операторы и МО ЛКАО. Адаптированные по симметрии молекулярные орбитали тетраэдрических молекул. Молекулярные орбитали ферроцена. Молекулярные орбитали циклопентадиенилтрикарбонилмарганца. Заселенность орбиталей в молекулах. Определение заселенности гибридных орбиталей на примере молекулы аммиака (точечная группа симметрии C_{3v}). Волновые функции метода валентных связей. Расчеты методом валентных схем с помощью групп перестановок на примере молекул с группами $S(2)$, $S(4)$ и $S(6)$. Конфигурационное взаимодействие. Факторизация по симметрии детерминанта конфигурационного взаимодействия на примерах координационных соединений.

Тема 17. Вращательные и ядерные спиновые состояния. Интенсивность вращательных переходов. Связывание спинов ядер по Клебшу-Гордану. Неприводимые представления ядерных спиновых состояний и спектры ЯМР. Сверхтонкое расщепление в спектрах ЭПР.

Вращательные волновые функции и уровни энергии. Теоретико-групповой подход к анализу вращательных состояний. Классификация значений J и K по неприводимым представлениям. Вращательная подгруппа. Статистические веса вращательных состояний. Правила отбора. Интенсивность вращательных переходов. Связывание спинов ядер по Клебшу-Гордану (на примере молекул хлорметана и фторметана). Неприводимые представления ядерных спиновых состояний и спектры ЯМР: анализ с использованием групп перестановок и метода проекционных операторов. Определение неприводимых представлений ядерных спиновых состояний на примере молекул метана и этилена. Сверхтонкое расщепление в спектрах ЭПР.

Тема 18. Аспекты симметрии в механизмах химических реакций. Электроциклические реакции. Реакции циклоприсоединения. Реакции перегруппировки и элиминирования. Структурная жесткость, вибранные и ровибронные эффекты и их роль в химических реакциях.

Группа химической реакции. Правила Вудворда-Хоффмана. Разрешенные и запрещенные реакции. Топологическая симметрия реакций. Анализ симметрии на примере реакции пре-вращения бутадиена в циклобутен. Правила отбора для запрещенных или несогласованных реакций. Электроциклические реакции (на примере изомеризации бутадиена - циклобутен). Реакции циклоприсоединения (на примере димеризации этилена). Реакции перегруппировки (на примере согласованного переноса двух связанных σ -групп). Реакции элиминирования с образованием радикалов (на примере фотолиза и термолиза циклопентанона). Структурная жесткость, вибранные и ровибронные эффекты и их роль в химических реакциях.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

сайт - <http://www.znaika.org/?q=teoriya-simmetrii>

сайт - <http://www.raduga.edusite.ru/html/simmetr/index.html>

сайт - http://www.bookshunt.ru/b32914_matematicheskie_osnovi_teorii_simmetrii

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

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

Пособие - <http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/books/spectroscopy/Poklonskii03.pdf>

Сайт - <http://graphics.distant.ru/nachgeom/05.html>

Сайт - <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/zorkii2/welcome.html>

Сайт - <http://chemlib.ru/books/item/f00/s00/z0000036/st022.shtml>

Сайт - <http://900igr.net/prezentatsii/geometrija/Simmetrija-v-prirode/024-Simmetrija-v-prirode.html>

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	<p>Изучение дисциплины следует начинать с проработки рабочей программы, особое внимание, уделяя целям и задачам, структуре и содержанию курса.</p> <p>Работа с конспектом лекций:</p> <p>Необходимо просматривать конспект сразу после занятий, отметьте материал конспекта лекций, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции. Регулярно отводите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания, умения и навыки по контрольным вопросам.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, лабораторным работам и курсовой работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, выполнению тестовых заданий и сдаче зачетов и экзаменов. <p>Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.</p>
зачет	<p>На зачете определяется качество и объем усвоенных студентами знаний, способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановки цели и выбору путей ее достижения, а также умение работать с нормативными документами в рамках дисциплины. Он может проводиться в устной или письменной формах. Форму проведения определяет кафедра. Подготовка к зачету - процесс индивидуальный. Тем не менее, существуют некоторые правила, знания которых могут быть полезны для всех. Залогом успешной сдачи зачета является систематическая работа над учебной дисциплиной в течение семестра. Подготовку желательно вести, исходя из требований программы учебной дисциплины. Целесообразно пошаговое освоение материала, выполнение различных заданий по мере изучения соответствующих содержательных разделов дисциплины. Если, готовясь к зачету, вы испытываете затруднения, обращайтесь за советом к преподавателю, тем более что при систематической подготовке у вас есть такая возможность. Готовясь к зачету, лучше всего сочетать повторение теоретических вопросов с выполнением практических заданий. Требования к знаниям студентов определены федеральным государственным образовательным стандартом и рабочей программой дисциплины. Цель зачета - проверка и оценка уровня полученных студентом специальных познаний по учебной дисциплине и соответствующих им умений и навыков, а также умения логически мыслить, аргументировать избранную научную позицию, реагировать на дополнительные вопросы, ориентироваться в массиве информации, дефиниций и категорий. Оценке подлежат правильность и грамотность речи студента, если зачет проводится в устной форме, а также его достижения в течение семестра. Дополнительной целью зачета является формирование у студентов таких качеств, как организованность, ответственность, трудолюбие, самостоятельность. Таким образом, проверяется сложившаяся у студента система знаний по дисциплине, что играет большую роль в подготовке будущего специалиста, способствует получению им фундаментальной и профессиональной подготовки. При подготовке к зачету важно правильно и рационально распланировать свое время, чтобы успеть на качественно высоком уровне подготовиться к ответам по всем вопросам. Во время подготовки к зачету студенты также систематизируют знания, которые они приобрели при изучении основных тем курса в течение семестра. Это позволяет им уяснить логическую структуру дисциплины, объединить отдельные темы в единую систему, увидеть перспективы ее развития. Самостоятельная работа по подготовке к зачету во время сессии должна планироваться студентом, исходя из общего объема вопросов, вынесенных на зачет, так, чтобы за предоставленный для подготовки срок он смог равномерно распределить приблизительно равное количество вопросов для ежедневного изучения (повторения). Важно, чтобы один последний день был выделен для дополнительного повторения всего объема вопросов в целом. Это позволяет студенту самостоятельно перепроверить усвоение материала.</p>

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

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации "Фундаментальная химия: материалы будущего".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.15.04 Теория симметрии в координационной химии

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Фундаментальная химия: материалы будущего

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Основная литература:

1. Ахметов, Н. С. Общая и неорганическая химия : учебник / Н. С. Ахметов. - 11-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2020. - 744 с. - ISBN 978-5-8114-4698-8. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/130476> (дата обращения: 18.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Гельфман, М. И. Неорганическая химия : учебное пособие / М. И. Гельфман, В. П. Юстратов. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2009. - 528 с. - ISBN 978-5-8114-0730-9. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/4032> (дата обращения: 18.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Аминов, Л. К. Теория симметрии (краткие конспекты лекций и задачи) : учебное пособие для магистрантов физического факультета. Ч. 2 / Л.К.Аминов . - Казань: КГУ, 2000. - 82 с.
2. Федотов, М. А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости : монография / М. А. Федотов. - Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2010. - 384 с. - ISBN 978-5-9221-1202-4. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/2151> (дата обращения: 18.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.15.04 Теория симметрии в координационной химии

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Фундаментальная химия: материалы будущего

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2023

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.