

Федеральное агентство по образованию  
ГОУ ВПО «Кемеровский государственный университет»  
Кафедра общей физики

«Утверждаю»  
Декан физического факультета

«   »                      2008 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
**курса «Основы теории химической связи»**

для специальности **010701 ФИЗИКА, СД.**

факультет: Физический

курс    3     
семестр    6     
лекции    36    (часов)  
практические занятия   18   (часов)  
лабораторные занятия        (часов)  
самостоятельные занятия  46  (часов)  
Всего часов   100  

экзамен             
(семестр)  
зачет    6     
(семестр)

Составители:

д.х.н., профессор Сечкарёв Б. А.

к.х.н., доцент кафедры общей физики КемГУ Титов Ф. В.

Кемерово, 2008

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей физики

Протокол № \_\_\_\_ от « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2008 г.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ Полыгалов Ю. И.

Одобрено методической комиссией физического факультета

Протокол № \_\_\_\_ от « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2008 г.

Председатель \_\_\_\_\_ Золотарев М. Л.

## 1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Учение о химической связи - центральная проблема современной химии. Число известных химических соединений близко к восьми миллионам, и ежегодно описывается около двадцати тысяч новых соединений. Число же возможных реакций между известными веществами настолько велико, что вряд ли можно надеяться на описание их всех в обозримом будущем. Не зная природу взаимодействия атомов в веществе, нельзя понять причины многообразия химических соединений, представить механизм их образования, их состав, строение, реакционную способность и энергетику химических реакций. Создание надежной модели, отражающей строение атомов, молекул и природу сил между ними, позволит рассчитывать свойства веществ, не прибегая к эксперименту.

Умение рассчитать скорость реакции и управлять скоростью не менее важно, чем умение определить ее направление. Понимание наблюдающихся здесь кинетических закономерностей невозможно без проникновения в элементарный акт химического процесса, в котором разрушаются и создаются молекулы. Без знания теории строения молекул и химической связи понять элементарный химический акт, построить даже простую его схему и на основании этого предвидеть кинетические характеристики невозможно. Без знания теории строения невозможно создавать материалы с заранее заданными свойствами, например полупроводниковые материалы, специальные керамические материалы, стекла, стали и др.

Настоящий курс посвящен теории химической связи, которая стала универсальным аппаратом трактовки химических свойств и реакционной способности молекул, знакомит с результатами ее применения к описанию строения и свойств соединений различных классов.

Основное внимание в данном курсе уделяется изложению наиболее важных для химической науки концепций теории химической связи в свете современных количественных расчетов.

### **Задачи изучения дисциплины:**

- знакомство с современными концепциями теории химической связи;
- знакомство с основными методами и результатами современных квантово - механических расчетов;
- умение применять теорию химической связи к описанию строения и свойств соединений различных классов.
- приобретение навыков расчетов основных параметров химической связи, составление энергетических диаграмм молекулярных орбиталей.

## 2. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№	Название и содержание разделов, тем, модулей	Объем часов					Формы контроля
		Общий	Аудиторная работа			Самостоятельная работа	
			Лекции	Практические (или семинарские)	Лабораторные		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Развитие представлений о химической связи	5	2	1		2	
2.	Волны материи	5	2	1		2	
3.	Атомные орбитали.	5	2	1		2	
4.	Периодическая система элементов	7	2	1		4	Контрольная работа
5.	Молекулярные электронные волновые функции	9	4	1		4	
6.	Приближение ЛКАО для молекулярных орбиталей	10	4	2		4	
7.	Симметрия и орбитали	5	2	1		2	
8.	Молекулярные орбитали и двухэлектронная связь	10	4	2		4	
9.	Модель независимых электронов	9	2	1		6	
10.	Теория возмущений	7	2	1		4	
11.	Теория поля лигандов	10	4	2		4	
12.	Основы метода валентных схем	10	4	2		4	
13.	Межмолекулярные силы.	8	2	2		4	
<b>Итого:</b>		<b>100</b>	<b>36</b>	<b>18</b>		<b>46</b>	<b>Семестровая работа</b>

### 3. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 1. Развитие представлений о химической связи.

Ранние концепции химической связи. Возникновение учения о ковалентной связи. Новая модель атома и теория Косселя. Теория Льюиса. Возникновение квантовой химии.

#### 2. Волны материи.

Волновая механика. Корпускулярно – волновой дуализм света. Уравнение Шредингера. Гамильтониан. Физический смысл волновой функции.

#### 3. Атомные орбитали.

Уравнение Шредингера для атома водорода. Форма атомных орбиталей. Радиальные волновые функции атома водорода. Орбитали многоэлектронных атомов. Энергии атомных орбиталей. Атомные единицы.

#### 4. Периодическая система элементов.

Периодическая таблица. Потенциалы ионизации, сродство к электрону и электроотрицательность. Атомные радиусы.

#### 5. Молекулярные электронные волновые функции.

Разделение электронного и ядерного движений. Электронные волновые функции и наблюдаемые. Молекулярные орбитали двухатомных молекул. Фотоэлектронная спектроскопия и теорема Купманса.

#### 6. Приближение ЛКАО для молекулярных орбиталей.

Обоснование метода ЛКАО. Применение метода ЛКАО к молекулам от  $Li_2$  до  $F_2$ . Вариационный принцип и секулярные уравнения. Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул. Изоэлектронный принцип. Конфигурации типа благородных газов и формальное состояние окисления. Ионная связь.

#### 7. Симметрия и орбитали.

Ограничения, налагаемые симметрией на молекулярные орбитали. Операции симметрии, точечные группы и таблицы характеров. Прямые произведения. Молекулярные орбитали линейных и изогнутых молекул  $AN_2$ . Диаграммы Уолша.

#### 8. Молекулярные орбитали и двухэлектронная связь.

Эквивалентность электронов и антисимметрия. Эквивалентные и локализованные орбитали. Гибридизация. Отталкивание электронных пар: геометрия молекул на основе подхода Седжвика – Пауэлла.

#### 9. Модель независимых электронов.

Гамильтонианы невзаимодействующих электронов. Теория  $\pi$  – электронов Хюккеля. Плотности заряда и порядки связей. Корреляция свойств молекул в

рамках теории  $\pi$  – электронов Хюккеля. Введение других атомов в теорию Хюккеля. Расширенные модели Хюккеля.

#### **10. Теория возмущений.**

Решение уравнений Шредингера для возмущенных систем. Уровни энергии многоэлектронных атомов.

#### **11. Теория поля лигандов.**

Случаи сильного и слабого поля лигандов. Октаэдрические комплексы. Комплексы с другой геометрией. Теория молекулярных орбиталей комплексов переходных металлов. Сандвичевые соединения.

#### **12. Основы метода валентных схем.**

Волновая функция Гайтлера-Лондона для двухэлектронной связи. Валентные состояния и гибридизация. Теория резонанса и канонические структуры.

#### **13. Химическая связь и реакционная способность.**

Поверхности потенциальной энергии. Теория скоростей реакций изолированной молекулы. Энергия локализации. Теория химических реакций в методе возмущений МО. Теория граничных орбиталей.

#### **14. Межмолекулярные силы.**

Вандерваальсовы силы. Стерические силы. Донорно-акцепторные комплексы и дативная связь. Водородная связь.

### **4. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ**

1. Волновая механика. Корпускулярно – волновой дуализм света.
2. Уравнение Шредингера. Гамильтониан. Физический смысл волновой функции.
3. Уравнение Шредингера для атома водорода.
4. Форма атомных орбиталей.
5. Орбитали многоэлектронных атомов. Энергии атомных орбиталей.
6. Периодическая таблица. Потенциалы ионизации, сродство к электрону и электроотрицательности. Атомные радиусы.
7. Молекулярные орбитали двухатомных молекул.
8. Фотоэлектронная спектроскопия и теорема Купманса.
9. Приближение ЛКАО для молекулярных орбиталей.
10. Применение метода ЛКАО к молекулам от  $Li_2$  до  $F_2$ .
11. Вариационный принцип и секулярные уравнения.
12. Молекулярные орбитали гетероядерных двухатомных молекул.
13. Конфигурации типа благородных газов и формальное состояние окисления.
14. Ионная связь.

15. Ограничения, налагаемые симметрией на молекулярные орбитали.
16. Молекулярные орбитали линейных и изогнутых молекул  $\text{AH}_2$ .
17. Эквивалентность электронов и антисимметрия.
18. Гибридизация.
19. Геометрия молекул на основе подхода Седжвика – Пауэлла.
20. Гамильтонианы невзаимодействующих электронов. Теория  $\pi$  – электронов Хюккеля.
21. Плотности заряда и порядки связей.
22. Корреляция свойств молекул в рамках теории  $\pi$  – электронов Хюккеля.
23. Металлы и твердые тела с ковалентной связью. Полупроводники.
24. Решение уравнений Шредингера для возмущенных систем.
25. Уровни энергии многоэлектронных атомов.
26. Теория поля лигандов.
27. Теория молекулярных орбиталей комплексов переходных металлов.
28. Волновая функция Гайтлера-Лондона для двухэлектронной связи.
29. Теория резонанса и канонические структуры.
30. Поверхности потенциальной энергии.
31. Теория скоростей реакций изолированной молекулы.
32. Теория химических реакций в методе возмущений МО.
33. Теория граничных орбиталей.
34. Вандерваальсовы силы.
35. Водородная связь.

## 5. КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

Контрольные задания прилагаются (Сечкарев Б. А., Титов Ф. В. Вопросы и задачи по курсу «Основы химической связи». Учебно-методическое пособие. Кузбассвузиздат 2003)

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

### Список основной учебной литературы

Сведения об учебниках			Количество экземпляров в библиотеке на момент утверждения программы	Электронный вариант в библиотеке факультета
Наименование, гриф	Автор	Год издания		
Химическая связь. Учебное пособие. Реко-	Сечкарев Б. А., Титов Ф. В.	2006	60	+

мендовано СибРУМЦ, Кузбассвузиздат,				
Вопросы и задачи по курсу «Основы хи- мической связи». Учебно-методическое пособие. Кузбассвузиз- дат,	Сечкарев Б. А., Титов Ф. В.	2003	60	+
Химическая связь М., Мир,	Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер	1980	3	-

Дополнительная литература:

1. В.Г. Цирельсон. Химическая связь и тепловое движение атомов в кристаллах. М.: Винити, 1993.
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул, Ростов-на-Дону, Феникс, 1997.
3. Терешин Г.С. Химическая связь и строение вещества, М., Просвещение, 1980.
4. Р. Дикерсон., Г. Грей, Дж. Хейт Основные законы химии, т.1, М., Мир, 1982.
5. К.С. Краснов. Строение молекул и химическая связь. М: Высшая школа, 1985.
6. И.Б. Берсукер. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л: Химия, 1986.

### Сведения о переутверждении РП на текущий учебный год и регистрация изменений

№ из- ме- не- ния	Учебный год	Содержание изменений	Преподаватель- разработчик программы	Рабочая программа пере- смотрена и одобрена на заседании кафедры	Внесенные изменения утверждаю: <u>Декан факультета:</u>
				Протокол № _____ «__» _____ 200_ г.	«__» _____ 200_ г.
				Протокол № _____ «__» _____ 200_ г.	«__» _____ 200_ г.
				Протокол № _____ «__» _____ 200_ г.	«__» _____ 200_ г.