

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Факультет хімії, екології та фармації
Кафедра хімії та технологій

СИЛАБУС
нормативної навчальної дисципліни

Квантова хімія (будова речовин та хімічний зв'язок)

Підготовки БАКАЛАВРА

Галузі знань 10 Природничі науки
Спеціальності 102 Хімія
Освітньо-професійної програми Хімія
Форма навчання: денна

Луцьк – 2021

Силабус навчальної дисципліни «Квантова хімія (будова речовин та хімічний зв'язок)» підготовки бакалавра, галузі знань 10 Природничі науки, спеціальності 102 Хімія, освітньо-професійної програми Хімія, форма навчання – денна за навчальним планом, затвердженим 2020 р.

Розробники: Юрченко О.М., доцент кафедри хімії та технологій,
кандидат фізико-математичних наук, доцент
Кормош Ж.О., професор кафедри хімії та технологій
кандидат хімічних наук, доцент

Силабус навчальної дисципліни затверджено на засіданні кафедри хімії та технологій,

протокол № 1 від 9 вересня 2021 р.

Завідувач кафедри
д.х.н., професор



(Олексеюк І.Д.)

© Юрченко О.М.,
Кормош Ж.О.
2021

I. Опис навчальної дисципліни

II. Інформація про викладача

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітньо-професійна програма, освітній рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Денна форма навчання	10 Природничі науки 102 Хімія Хімія бакалавр	Нормативна
Кількість годин/кредитів 120/ 4		Рік навчання 1
		Семестр 2
		Лекції 20 год.
		Практичні (семінарські) __год.
		Лабораторні 32 год.
Індивідуальні год.		
ІНДЗ: немає	Самостійна робота 60 год.	
	Консультації 8 год.	
	Форма контролю: іспит	

Юрченко Оксана Миколаївна
Кандидат фізико-математичних наук
Доцент
Доцент кафедри хімії та технологій
0951752486, Yurchenko.Oksana@vnu.edu.ua
<http://194.44.187.20/cgi-bin/timetable.cgi>

III. Опис дисципліни

1. Анотація курсу. Навчальна дисципліна «Квантова хімія (будова речовин та хімічний зв'язок)» передбачена як нормативна для підготовки бакалавра, галузі знань 10 Природничі науки, спеціальності 102 Хімія, за освітньої програмою Хімія. При вивченні дисципліни «Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок)» студенти отримують уявлення про квантово-механічні підходи до теорії будови атома, молекули, знайомляться з основними методами розрахунку атомних і молекулярних систем, областями застосування квантової хімії; також квантова хімія пояснює залежність між будовою і властивостями речовини.

2. Пререквізити: Вивчення теоретичного курсу базується на знаннях, отриманих студентами при вивченні курсів фундаментальної підготовки „Загальна хімія”, „Неорганічна хімія”, „Фізика”.

3. Метою вивчення навчальної дисципліни “Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок)” є дати студенту уявлення про квантово-механічні підходи до теорії хімічного зв'язку, основні методи розрахунку атомних і молекулярних систем, області застосування квантової хімії; а також про показати залежність будови і властивостей.

Основними завданнями вивчення дисципліни “Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок)” є сформувати в студентів уявлення про місце квантової хімії серед інших

наук, про значення і області застосування обчислювальних методів теоретичної хімії; ознайомити з основами квантової теорії, математичним апаратом квантової хімії, прикладами розв'язку рівняння Шредінгера для найпростіших систем, атомних і молекулярних систем; навчити студентів застосовувати отримані теоретичні знання при інтерпретації розрахованих характеристик багатоатомних молекул; сформувані знання про взаємозв'язок між природою хімічного зв'язку, будовою речовини і її властивостями.

4. Результати вивчення курсу (компетентності та програмні результати навчання).

Інтегральна компетентність (ІК)

ІК. Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми хімії або у процесі навчання, що передбачає застосування певних теорій та методів природничих наук і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Загальні компетентності (ЗК)

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 9. Прагнення до збереження навколишнього середовища.

ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

Фахові компетентності (ФК)

ФК1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

ФК4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

ФК5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

ФК10. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

Програмні результати навчання

ПРН 02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів

ПРН 05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.

ПРН 07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.

ПРН 15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.

ПРН 17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.

ПРН 18. Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.

ПРН 21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.

5. Структура навчальної дисципліни.

Назви змістових модулів і тем	Усього	Лек.	Лабор.	Сам. роб.	Конс.	Поточний контроль (бали)
Змістовий модуль 1. Основи квантової хімії						
Тема 1. Вступ. Предмет квантової механіки і квантової хімії.	2			2		
Тема 2. Теоретичні та експериментальні основи квантової механіки.	10		2	4		4
Тема 3. Математичний апарат квантової механіки.	10	2	2	4		2
Тема 4. Основні постулати квантової механіки.	10	2	2	4		2
Тема 5. Найпростіші приклади застосування квантової механіки. Вільна частинка. Потенціальна яма. Гармонічний осцилятор. Жорсткий ротатор.	16	2	4	4	2	4
Разом за модулем 1	48	6	10	18	2	12
Змістовий модуль 2. Квантово-хімічний опис будови атомів.						
Тема 6. Розв'язок рівняння Шредінгера для атома Гідрогену. Атомні орбіталі.	10	2	2	4		2
Тема 7. Властивості гідрогенподібних атомів.	8		2	4		2
Тема 8. Наближені методи розв'язку квантовомеханічних задач.	4			4		
Тема 9. Хвильова функція багатоелектронної атомної системи. Одноелектронне наближення. Визначник Слетера	10	2	2	4		2
Тема 10. Метод самоузгодженого поля Хартрі та Хартрі-Фока. Наближені аналітичні функції атомних орбіталей.	12	2	2	4		4
Тема 11. Енергетичні рівні багатоелектронних атомів. .	8		2	4		2
Тема 12. Квантові числа багатоелектронного атома. Атомні терми. Магнітні властивості і спектри атомів. Надтонка взаємодія.	14	2	2	4	2	4
Разом за модулем 2	66	8	12	28	2	16
Змістовий модуль 3. Квантово-хімічний опис будови молекул						
Тема 11. Молекула в квантовій хімії. Наближення Борна-Опенгеймера. Метод валентних зв'язків.	8		2	4		2
Тема 12. Метод молекулярних орбіталей. Основні положення.	8	2	2	2		2
Тема 13. МО гомоядерних двоатомних молекул. Молекулярні терми.	8	2	2	2		2
Тема 14. МО гетероядерних двоатомних молекул.	6		2	2		2
Тема 15. Метод молекулярних орбіталей Хюккеля.	16	2	2	4	4	4
Разом за модулем 3	46	6	10	14	4	12
Всього годин:	120	20	32	60	8	40

6. Завдання для самостійного опрацювання.

№ з/п	Тема
1	Предмет квантової механіки і квантової хімії. Основні етапи розвитку квантової теорії. Теоретичні та експериментальні основи квантової хімії.
2	Наближені методи розв'язку квантовомеханічних задач.
3	Фізичний зміст квантових чисел n , l і m . Магнітний орбітальний момент. Спінові функції. Спінові квантові числа.
4	Метод самоузгодженого поля (СУП) Хартрі. Основний та кулонівський інтеграл. Одноелектронні рівняння. Ефективний потенціал. Орбітальна енергія. Обмінний інтеграл. Система рівнянь Хартрі-Фока.
5	Заповнення енергетичних рівнів атомів електронами. Принцип побудови періодичної системи хімічних елементів Д.І.Менделєєва. Потенціал іонізації та спорідненість до електрона. Заповнення енергетичних рівнів атомів електронами. Принцип побудови періодичної системи хімічних елементів Д.І.Менделєєва. Потенціал іонізації та спорідненість до електрона.
6	Молекула в квантовій хімії. Наближення Борна-Опенгеймера. Метод валентних зв'язків.
7	Квантово-хімічний опис будови молекул з використанням методу СУП: метод Хартрі-Фока-Рутаана.
8	МО гомоядерних двоатомних молекул.
9	МО гетероядерних двоатомних молекул.
10	Метод МОХ Хюккеля. Розрахунок бензену.

IV. Політика оцінювання

У разі пропуску студентом лабораторних занять та модульних контрольних з поважних причин передбачається їх відпрацювання.

V. Підсумковий контроль

Формою підсумкового контролю успішності навчання є іспит, який проводиться в усній формі. Якщо підсумкова оцінка (бали) з дисципліни є сумою поточного і модульного контролю і становить не менше 75 балів то, за згодою студента, вона може бути зарахована як підсумкова оцінка з навчальної дисципліни.

VI. Шкала оцінювання

Оцінка в балах за всі види навчальної діяльності	Оцінка
90 – 100	Відмінно
82 – 89	Дуже добре
75 - 81	Добре
67 -74	Задовільно
60 - 66	Достатньо
1 – 59	Незадовільно

VI. Рекомендована література та інтернет-ресурси

1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. / Д.И. Блохинцев. - М.: Наука, 1983. - 664 с.
2. Блохинцев Д.И. Квантовая механика. / Д.И. Блохинцев. - М.: Наука, 1988. - 664 с.
3. Цюликe Л. Квантовая химия: пособие в 2 т. Т.1. Основы и общие методы. / Л. Цюликe. - М.: Мир, 1976. - 512 с.
4. Жидомиров Г.М. Прикладная квантовая химия. / Г.М.Жидомиров, А.А. Багатурьянц, И.А. Абронин. - М.: Химия, 1979. - 296 с.
5. Абаренков И.В. Начала квантовой химии. / И.В. Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В. Тулуб. - М.: Высш. шк. - 1989, 303 с.
6. Ландау Л.Д. Квантовая механика. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1972. - 368 с.
7. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. / С. Фудзинага. - М.: Мир, 1983. - 461 с.
8. Маррел Дж. Химическая связь./ Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер. - М.: Мир, 1980. - с.382.
9. Татевский В.М. Классическая теория строения молекул и квантовая механика. / В.М. Татевский. - М.: Химия, 1973. - 520 с.
10. Блюменфельд Д. Курс квантовой химии и строения молекул. / Д. Блюменфельд, А.К. Кукушкин. - 1980, 136 с.
11. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков. / А. М. Мелешина. - М.: Высш. шк., 1980. - 215 с.
12. Фларри Р. Квантовая химия. / Р. Фларри. - М.: Мир, 1985. - 472 с.
13. Минкин В.И. Теория строения молекул. / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М.Миняев - М.: Высшая школа, 1979. - 408 с.
14. Минкин В.И. Квантовая химия органических соединений (механизмы реакций). / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М.Миняев. - М.: Химия, 1986. - 248 с.
15. Блохинцев Д.И. Принципиальные вопросы квантовой механики. / Д.И. Блохинцев. - М.: Наука, 1987. - 149с.
16. Блохинцев Д.И. Квантовая механика: Лекции по избранным вопросам / Д.И. Блохинцев; ред. А.В.Ефремова - М.: Изд-во МГУ, 1988. -
17. Степанов Н.Ф. Квантовая механика молекул и квантовая химия: Учеб.пособие. / Н.Ф.Степанов, В.И.Пупышев. - М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1991. - 384с.
18. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. / Н.Ф.Степанов. - М.: Мир, 2001. - 519 с.
19. Заградник Р. Основы квантовой химии. / Р.Заградник, Р. Полак. - М., Мир, 1979. - 504 с.
20. Яцимирский К.Б. Химическая связь. / К.Б.Яцимирский, В.К. Яцимирский. - К.: Вища школа, 1975. - 304 с.
21. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь./ К.С. Краснов. - М.: Высшая школа, 1984. - 295 с.
22. Волькенштейн М.В. Строение и физические свойства молекул. / М.В. Волькенштейн . - М.: Академия наук СССР, 1955. - 640 с.
23. Жданов Ю.А. Теория строения органических соединений./ Ю.А. Жданов. - М.: Высшая школа, 1971. - 284 с.
24. Карапетьянц М.Х. Строение вещества./ М.Х. Карапетьянц, И.С.Дракин. - М.: Высшая школа, 1978. -304 с.
25. Картмелл Э., Фоулс Г. Валентность и строение молекул./ Э. Картмелл, Г. Фоулс. - М.: Химия, 1979. - 455 с.
26. Татевский В.М. Строение молекул и физико-химические свойства молекул и веществ. / В.М. Татевский. - М.: Изд-во Московск. унив-та, 1993. - 462 с.
27. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. / Р. Гиллеспи. - М.: Мир, 1975. - 182 с.
28. Уитли П. Определение молекулярной структуры. / П. Уитли. - М.: Мир, 1970. - 296с.
29. Коулсон Ч. Валентность./ Ч. Коулсон. - М.: Мир. 1965. - 427 с.

30. Юрченко О.М., Кормош Ж.О., Савчук Т.І., Корольчук С.І. Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок). Частина 1. Основи квантової хімії : конспект лекцій. - Луцьк : ПП "Іванюк В.П.", 2021. -60 с.
31. Юрченко О.М., Кормош Ж.О., Савчук Т.І., Корольчук С.І. Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок). Частина 2. Гідрогенподібний атом : конспект лекцій. - Луцьк : ПП "Іванюк В.П.", 2021. -36 с.
32. Юрченко О.М., Кормош Ж.О., Савчук Т.І., Корольчук С.І. Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок). Частина 3. Багатоелектронні системи : конспект лекцій. - Луцьк : ПП "Іванюк В.П.", 2021. - 56 с.

VII. ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДО ЕКЗАМЕНУ

1. Предмет квантової хімії. Хронологія. Сучасний стан і перспективи розвитку квантової хімії.
2. Теоретичні основи квантової механіки. Гіпотеза де Бройля. Хвилі де Бройля. Експериментальне підтвердження гіпотези де Бройля. Принцип невизначеності Гейзенберга.
3. Математичний апарат квантової механіки. Оператори і їх властивості. Власні функції та власні значення.
4. Математичний апарат квантової механіки. Диференціальні рівняння другого порядку. Розклад функцій в ряди. Степеневі ряди та ряди Фур'є.
5. Математичний апарат квантової механіки. "Хороші функції". Векторне числення.
6. Перший та другий постулати квантової механіки.
7. Третій та четвертий постулати квантової механіки.
8. П'ятий та шостий постулати квантової механіки.
9. Розв'язок рівняння Шредінгера для вільної частинки.
10. Розв'язок рівняння Шредінгера для частинки, що знаходиться в одновимірній потенціальній ямі.
11. Розв'язок рівняння Шредінгера для частинки, що знаходиться в двовимірній потенціальній ямі.
12. Розв'язок рівняння Шредінгера для частинки, що знаходиться в тривимірній потенціальній ямі.
13. Застосування моделі частинки в потенціальній ямі для пояснення спектрів спряжених систем.
14. Розв'язок рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора. Ангармонічний осцилятор.
15. Розв'язок рівняння Шредінгера для жорсткого ротатора.
16. Розв'язок рівняння Шредінгера для атома Гідрогену. Перетворення декартових координат в сферичні. Процедура розділення змінних. Θ -, Φ - та R -рівняння.
17. Атом Гідрогену. Розв'язок Φ - та Θ -рівнянь. Поліноми Лежандра. Сферичні гармоніки.
18. Атом Гідрогену. Розв'язок R -рівняння. Поліноми Лягера.
19. Атом Гідрогену. Радіальна функція розподілу. Кутові частини хвильових функцій, їх позначення та діаграми.
20. Хвильові функції Гідрогенподібних атомів. Графічне зображення атомних орбіталей.
21. Властивості Гідрогенподібного атома. Розрахунок середньої відстані електрона до ядра та найбільш ймовірного положення електрона в атомі.
22. Спектр Гідрогенподібного атома. Правила відбору. Формула Малікена-Ріке.
23. Гідрогенподібний атом. Оператори квадрату і проєкцій кутових моментів руху електрона.
24. Гідрогенподібний атом. Фізичний зміст квантових чисел n , l і m .
25. Гідрогенподібний атом. Магнітний орбітальний момент.
26. Гідрогенподібний атом. Спін електрона. Спінові функції. Спінові квантові числа.
27. Багатоелектронний атом. Поняття орбіталі і спін-орбіталі. Одноелектронне наближення.
28. Багатоелектронний атом. Принцип Паулі і визначник Слетера. Відкриті і закриті оболонки.

29. Багатоелектронний атом. Гамільтоніан багатоелектронного атома. Труднощі на шляху розв'язання рівняння Шредінгера для багатоелектронного атома.
30. Багатоелектронний атом. Метод самоузгодженого поля Хартрі. Основний та кулонівський інтеграл. Рівняння Хартрі або одноелектронні рівняння.
31. Багатоелектронний атом. Метод Хартрі-Фока. Повна енергія атома. Обмінний інтеграл. Система рівнянь Хартрі-Фока. Орбітальна енергія.
32. Багатоелектронний атом. Наближені аналітичні функції атомних орбіталей. АО Слетера-Зенера. Двоекспоненціальні і гаусівські АО. Правила Слетера для визначення сталих екранування.
33. Енергетичні рівні багатоелектронних атомів. Принципи.
34. Потенціал іонізації та спорідненість до електрона.
35. Квантові числа багатоелектронних атомів. Спін-орбітальна взаємодія. Зв'язок Расела-Сандерса.
36. Терми багатоелектронних атомів. Правила Гунда.
37. Системи термів для різних конфігурацій еквівалентних і нееквівалентних електронів.
38. Магнітні властивості і спектри багатоелектронних атомів. Фактор Ланде. Правила відбору.
39. Розщеплення атомних термів в електричному та магнітному полях. Надтонка взаємодія.
40. Теорія хімічного зв'язку. Наближення Борна-Опенгеймера.
41. Метод валентних зв'язків. Суть методу. Молекула водню.
42. Метод валентних зв'язків. Розрахунок молекули водню. Визначення енергії орбіталей та коефіцієнтів розкладу.
43. Метод валентних зв'язків. Розрахунок молекули водню. Побудова спін-орбіталей та обчислення основного та збудженого станів атома водню. Криві потенціальної енергії.
44. Метод валентних зв'язків. Фізичний зміст обмінного інтегралу. Усупільнення електронів. Основні положення методу ВЗ.
45. Метод молекулярних орбіталей. Загальна характеристика.
46. Наближення МО ЛКАО.
47. Метод МО ЛКАО. Гомоядерні двохатомні молекули, утворені з елементів перших двох періодів.
48. Класифікація і позначення молекулярних орбіталей гомоядерних молекул.
49. Метод МО ЛКАО. Електронні конфігурації гомоядерних молекул. Кратність зв'язку. Енергія зв'язку. Міжядерна відстань.
50. Молекулярні терми гомоядерних двохатомних молекул.
51. Метод МО ЛКАО. Гетероядерні двохатомні молекули.
52. Метод МО ЛКАО. Ізоелектронні двохатомні молекули.
53. Теорема віріалу.
54. Метод МО Хюкеля. Суть методу.
55. Метод МО. Електронна густина на атомі. Заряд атома. Порядок зв'язку. Індекс вільної валентності. Молекулярні діаграми.
56. Метод МОХ. Розрахунок етилену, алілу.
57. Метод МОХ. Розрахунок бутадієну. Віковий визначник. Енергії МО, енергія π -зв'язку, енергія делокалізації.
58. Метод МОХ. Бутадієн. МО бутадієну. Розрахунок електронної густини, заряду на атомах, порядку зв'язку, індексу вільної валентності. Молекулярна діаграма.
59. Метод МОХ. Ароматичні сполуки. Бензен. Віковий визначник. Енергії МО, енергія π -зв'язку, енергія делокалізації.
60. Метод МОХ. Бензен. МО бензену. Розрахунок електронної густини, заряду на атомах, порядку зв'язку, індексу вільної валентності. Молекулярна діаграма.
61. Метод МОХ. Правило ароматичності " $4n+2$ ".
62. Електронно-обертально-коливні стани молекул. Повна енергія молекули як сума електронної, коливної та обертальної складових. Потенціальна крива молекули. Рівноважна конфігурація. Енергія дисоціації.

63. Закономірності в рівноважних між'ядерних відстанях зв'язаних атомів.
64. Валентні кути. Теорія відштовхування локалізованих електронних пар.
65. Міцність хімічного зв'язку.
66. Дипольний момент молекули. Розмірність, одиниці вимірювання. Полярні і неполярні молекули.
67. Електричний дипольний момент і симетрія молекул.
68. Молекула в зовнішньому електричному полі. Деформаційна та орієнтаційна поляризованості.
69. Зв'язок молекулярних констант- дипольного моменту і поляризованості - з макроскопічними характеристиками - діелектричною проникністю і показником заломлення. Молярна поляризація, рівняння Ланжевена-Дебая для полярних і неполярних молекул. Молярна рефракція. Рівняння Лорентц-Лоренца. Адитивність рефракції.
70. Поляризація молекули в статичному полі та полях високої та низької частот.
71. Магнітний момент молекули і його складові. Діа-, пара- та феромагнетики.
72. Магнітна сприйнятливості молекули. Закон Кюрі. Закон Кюрі-Вейса. Енергіямолекули в магнітному полі.
73. Обертальні стани двохатомних молекул. Наближення жорсткого ротатора. Положення ліній в обертальному спектрі. Обертальна стала. Визначення рівноважної між'ядерної відстані та моменту інерції. Діаграма відносного розташування рівнів обертальної енергії. Нежорсткий коливний ротатор.
74. Обертальні стани багатоатомних молекул. Лінійні молекули. Молекули типу симетричної дзиги.
75. Обертальні стани багатоатомних молекул. Молекули типу сферичної дзиги. Молекули типу асиметричної дзиги.
76. Коливні стани двохатомних молекул в наближеннях гармонічного і ангармонічного осциляторів.
77. Коливні стани багатоатомних молекул. Нормальні координати, нормальні коливання. Кількість ступенів вільності коливань нелінійних і лінійних багатоатомних молекул. Повна енергія коливань.
78. Коливні стани багатоатомних молекул. Типи нормальних коливань лінійних і нелінійних триатомних молекул. Валентні та деформаційні коливання.
79. Коливні стани багатоатомних молекул. Коливання пірамідальних, плоских чотириатомних та тетраедричних молекул.
80. Правила відбору і спектр багатоатомної молекули. Правило альтернативної заборони. Використання коливних спектрів для визначення будови молекул.
81. Коливні та коливально-обертальні спектри. Основні рівняння P- і R-гілки. Визначення основних характеристик молекули (силової сталої, енергії дисоціації, частоти коливань, коефіцієнта ангармонічності).
82. Координаційні сполуки. Теорія кристалічного поля Бете. Координаційне число і симетрія поля. Розщеплення d-рівня в полях лігандів різної симетрії.
83. Слабке та сильне кристалічне поле. Спектрохімічний ряд. Заповнення d-орбіталей в слабкому та сильному полях лігандів. Енергія стабілізації кристалічним полем.
84. Ефект Яна-Телера.
85. Магнітні властивості комплексних сполук.
86. Спектри поглинання координаційних сполук.
87. Загальна характеристика міжмолекулярної взаємодії. Сили Ван-дер-Ваальса .
88. Електростатична або орієнтаційна міжмолекулярна взаємодія.
89. Індукційна взаємодія або ефект Дебая.
90. Дисперсійна взаємодія або ефект Лондона.
91. Молекули Ван-дер-Ваальса.
92. Іон-молекулярна взаємодія.
93. Енергія міжмолекулярної взаємодії. Потенціал Ленард-Джонса.