

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

А.Л. Толстик

28 2015

(дата утверждения)

Регистрационный № УД- 1402 /уч

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальностей:**

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

Направление специальности:

1-31 05 01-03 Химия (фармацевтическая деятельность)

2015 г

Учебная программа составлена на основе образовательного стандарта ОСВО 1-31 05 01-2013, утвержденного и введенного в действие постановлением Министерства образования Республики Беларусь №87 от 30.08.2013 г., и учебного плана G 31-153/уч., утвержденного 30.05.2013 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Ю.С. Головки, доцент межкафедрального центра – кафедры ЮНЕСКО по естественнонаучному образованию, кандидат химических наук, доцент

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Межкафедральным центром – кафедрой ЮНЕСКО по естественнонаучному образованию Белорусского государственного университета

(протокол № 2 от 1.10.2015);

Научно-методическим советом Белорусского государственного университета

(протокол № 2 от 11.11.2015).

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Дисциплина «Строение вещества» является важной частью подготовки специалистов химических специальностей.

Предметом настоящей дисциплины является изучение и систематизация современных представлений о том, как устроено вещество и каким образом свойства вещества в различных фазовых состояниях зависят от свойств составляющих его атомов, молекул и ионов.

На сегодняшний день для решения многих практических задач требуются сведения о структуре вещества и его свойствах. Взаимосвязь между строением вещества и его свойствами также не вызывает сомнений. В то же время наиболее естественный способ получения подобной информации – синтез вещества с последующим экспериментальным исследованием его свойств и строения – весьма дорогостоящ и трудоемок. По этой причине велика потребность в теоретических методах, позволяющих предсказывать макроскопические свойства веществ по некоторому ограниченному числу структурных данных. Такие подходы позволяют выбирать вещества с искомыми свойствами, не проводя большого объема экспериментальной работы.

Целями и задачами данной дисциплины являются создание системного представления о закономерностях изменения свойств веществ в зависимости от строения образующих их микрочастиц и внешних условий; расширение знаний о строении вещества, полученных студентами при изучении ряда фундаментальных дисциплин, преподаваемых на химическом факультете Белорусского государственного университета; получение практических навыков решения соответствующих задач.

В результате изучения дисциплины студенты должны *знать*:

- основы теории строения вещества;
- источники информации о строении вещества;
- способы описания свойств веществ в различных фазовых состояниях;
- области применения современных расчетных методов;

уметь:

- решать учебные и исследовательские задачи по моделированию структурных характеристик и термодинамических свойств веществ;
- использовать теоретический аппарат для объяснения и прогнозирования, решения расчетных задач;

владеть:

- азами современных подходов молекулярного моделирования;
- частными методиками прогнозирования свойств веществ с использованием принципов статистической механики, классической и квантовой теорий;
- методами поиска, накопления и обработки научной информации о взаимосвязи строения и свойств веществ.

Основные положения курса иллюстрируются многочисленными примерами из смежных химических дисциплин и оригинальных научных работ.

Часть рассматриваемых вопросов знакома студентам из курсов квантовой и физической химии; таковые рассматриваются лишь в общем плане.

В списке основной литературы представлены базовые учебники и монографии, которые рекомендуются при изучении ключевых разделов дисциплины. Дополнительная литература предназначена для углубленного ознакомления с отдельными вопросами дисциплины, практического закрепления полученных знаний и умений. Ее перечень не является исчерпывающим, равно как и обязательным для ознакомления.

Преподавание учебной дисциплины предусматривает проведение лекций, семинарских и практических занятий. Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине следует использовать индивидуальные задания, в том числе исследовательского характера. Эффективность самостоятельной работы студентов целесообразно проверять в ходе текущего и итогового контроля знаний в форме контрольных работ. Для общей оценки качества усвоения студентами учебного материала рекомендуется использование рейтинговой системы.

Изучение учебной дисциплины проводится в течение 6-го семестра. В соответствии с планом очной формы получения образования курс рассчитан на 84 часа (2,5 зачетные единицы), в том числе 28 аудиторных часов: 12 часов лекций, 4 часа семинарских, 10 часов практических занятий, 2 часа УСР. Форма аттестации – экзамен в 6-м семестре.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Введение. Понятие о строении вещества, структуре веществ. Фундаментальная взаимосвязь «структура – свойства».

Раздел 1. Межмолекулярные взаимодействия. Составляющие межмолекулярных взаимодействий. Теоретический вид и приближения для потенциалов притяжения и отталкивания. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ. Молекулярные комплексы, кластеры, ван-дер-Ваальсовы молекулы. Модельные потенциалы парных взаимодействий. Физико-химические проявления межмолекулярного взаимодействия. Водородная связь.

Раздел 2. Агрегатные состояния вещества и фазы, их сравнительная характеристика. Конденсированные фазы: кристаллы, жидкости, мезофазы, аморфные вещества, квазикристаллы, нанокристаллы. Фазовые диаграммы. Сверхкритические флюиды, их практическое применение.

Устойчивость фаз. Фазовые переходы. Уравнения состояния для газов, жидкостей и кристаллов.

Раздел 3. Статистическая механика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества. Статистические суммы для отдельных частиц и для систем. Поступательная, вращательная, колебательная, электронная статистические суммы. Термодинамические свойства идеального газа в приближении «жесткий ротатор – гармонический осциллятор».

Раздел 4. Реальные газы. Уравнения состояния реальных газов. Описание свойств реальных газов с позиций феноменологической и статистической термодинамики. Конфигурационный интеграл, функция Майера.

Раздел 5. Строение жидкостей и аморфных веществ. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Современные подходы к описанию структуры жидкостей – физические и химические теории. Флуктуации и корреляционные функции. Статистическая сумма и конфигурационный интеграл для жидкости. Радиальная функция распределения. Физические и модельные теории жидкого состояния. Использование модельных теорий для расчета свойств растворов неэлектролитов и полимеров. *Особенности аморфного состояния.*

Раздел 6. Строение кристаллов. *Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, понятие о пространственных группах симметрии кристаллов.* Типы кристаллов: атомные, ионные, молекулярные, металлические. *Цепочечные, слоистые и каркасные структуры.* Статистическая сумма для кристаллов. Энергия кристаллической решетки. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр. *Идеальные и реаль-*

ные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Статистическая сумма для кристаллов с точечными дефектами. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.

Раздел 7. Методы прогнозирования свойств молекул и веществ, основанные на классической и квантовой теории химического строения. Основные положения классической теории химического строения. Методы расчета, базирующиеся на классической теории строения. Метод молекулярной механики. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Вычислительные эксперименты. Квантово-химические методы.

Примечание. Темы, указанные курсивом, могут быть рекомендованы для самостоятельного изучения студентами.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы, занятия	Название раздела, темы, занятия; перечень изучаемых вопросов	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	Введение. Межмолекулярные взаимодействия	2	2					опрос
2	Агрегатные состояния вещества и фазы	1	2					опрос
3	Статистическая механика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества	2		2			1	контрольная работа
4	Реальные газы и способы описания их свойств	2	2					опрос
5	Основные теории, описывающие строение жидкости	2	2					опрос
6	Строение кристаллов. Статистическая сумма для кристаллов. Энергия кристаллической решетки	2	2					опрос
7	Методы прогнозирования свойств молекул и веществ	1		2			1	тест
ИТОГО		12	10	4			2	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Доменикано А., Харгиттаи И. Молекулярные структуры: прецизионные методы исследования. М.: Мир, 1997.
2. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во МГУ, 1986.
3. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982.
4. Павлечко Е.В., Головки Ю.С., Ивашкевич О.А. Строение вещества. Мн.: БГУ, 2015.
5. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высш. шк., 2000.
6. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, 2003.
7. Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
8. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
9. Смирнова Н.А. Молекулярные теории растворов. Л.: Химия, 1987.
10. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М.: Солон, 2005.
11. Татевский В.М. Строение и физико-химические свойства молекул и веществ. М.: Изд-во МГУ, 1993.
12. Atkins P., de Paula J. Physical Chemistry, 8th ed. OUP, 2006.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ЗАДАНИЙ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

Тематика контрольных заданий.

1. Анализ устойчивости фаз. Расчеты по уравнениям состояния. Определение параметров уравнений состояния и межмолекулярного взаимодействия.
2. Расчет вкладов в термодинамические свойства идеального газа методами статистической механики. Вычисление свойств идеальных газов на основании молекулярных и спектральных данных.
3. Описание строения и расчет свойств чистых жидкостей и растворов в рамках различных теорий.
4. Описание строения кристаллов. Теплоемкость кристаллических тел и энергия кристаллической решетки. Использование характеристических температур.
5. Расчет свойств молекул и веществ на базе классической теории химического строения. Составление аддитивных схем по принятой классификации.

ПЕРЕЧЕНЬ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СРЕДСТВ ДИАГНОСТИКИ РЕЗУЛЬТАТОВ УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Для контроля качества усвоения знаний студентами можно использовать следующий диагностический инструментарий:

- тестирование;
- защита индивидуальных заданий;
- контрольная работа.

**ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ
С ДРУГИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ СПЕЦИАЛЬНОСТИ**

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Физическая химия	Кафедра физической химии	Нет	Программы согласованы, протокол № 3 от 1.10.2015г.
Квантовая химия	Кафедра неорганической химии	Нет	

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ
на _____ / _____ учебный год**

№№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол ____ от _____ 20__ г.)

Заведующий кафедрой

д.х.н., профессор, академик НАНБ _____
(степень, звание) (подпись)

О.А. Ивашкевич
(И.О.Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

д.х.н., профессор, член-корр. НАНБ _____
(степень, звание) (подпись)

Д.В. Свиридов
(И.О.Фамилия)