

Белорусский государственный университет

**УТВЕРЖДАЮ**

Декан химического факультета  
Белорусского государственного университета

\_\_\_\_\_ Д.В. Свиридов

\_\_\_\_\_

(дата утверждения)  
Регистрационный № УД-\_\_\_\_\_/баз.

## **СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА**

**Учебная программа для специальности  
1-31 05 01 Химия**

2011 г

**СОСТАВИТЕЛЬ:**

Е. В. Павлечко, доцент кафедры электрохимии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент

**РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:**

Кафедрой электрохимии Белорусского государственного университета  
(протокол № \_\_\_\_ от \_\_\_\_\_);

Учебно-методической комиссией химического факультета Белорусского  
государственного университета

(протокол № \_\_\_\_ от \_\_\_\_\_);

Ответственный за редакцию: Е.В. Павлечко

Ответственный за выпуск: Е.В. Павлечко

## ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Курс «Строение вещества» предназначен для студентов 5-го курса химического факультета всех специализаций и читается в 9-м семестре.

**Целью данного курса** является систематическое изложение закономерностей изменения свойств веществ в зависимости от строения образующих их микрочастиц и внешних условий; расширение знаний о строении вещества, полученных студентами при изучении ряда фундаментальных курсов химического факультета; получение практических навыков расчетов свойств веществ на основании данных по их структуре и обратных задач.

## СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Номер раздела, темы, занятия	Название раздела, темы, занятия; перечень изучаемых вопросов	Количество часов				Управляемая самостоятельная работа студента
		Аудиторные				
		Лекции	Занятия (семинарские) практические	занятия лабораторные	КСР	
1	2	3	4	5	6	
1	Введение	2				2
2	Агрегатные состояния вещества и фазы, их сравнительная характеристика	2	2			2
3	Межмолекулярные взаимодействия.	2	4			3
4	Статистическая механика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества.	2	4		2	2
5	Строение жидкостей и аморфных веществ.	2				4
6	Физические и модельные теории жидкого состояния.	2	4			3
7	Строение кристаллов.	2	4		2	3
8	Строение твердых растворов.	2				3
9	Мезофазы и методы изучения их структуры.	2				2
10	Методы прогнозирования свойств молекул и веществ, основанные на классической теории химического строения.	2	2			2
11	Метод молекулярной механики. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Вычислительный эксперимент.	2	2			3
12	Квантово-химические методы.	4	2		2	2

**Введение.** Понятия «строение вещества», «структура вещества» и «строение молекул». *Электрические, магнитные и оптические свойства веществ.* Обзор экспериментальных и теоретических методов исследования строения молекул и веществ.

**1. Агрегатные состояния вещества и фазы, их сравнительная характеристика.** Конденсированные фазы: кристаллы, жидкости, мезофазы,

аморфные вещества, квазикристаллы, нанокристаллы. Сверхкритические фазы, их практическое применение.

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

**2. Межмолекулярные взаимодействия.** Составляющие межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ. Молекулярные комплексы, кластеры, ван-дер-ваальсовы молекулы. Потенциалы парных взаимодействий.

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

**4. Строение жидкостей и аморфных веществ.** Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Современные подходы для описания структуры жидкостей. Флуктуации и корреляционные функции. Статистическая сумма для жидкости и реального газа. Конфигурационный интеграл.

*Структура простых жидкостей и растворов неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.*

Физические и модельные теории жидкого состояния. Использование модельных теорий для расчета свойств растворов неэлектролитов и полимеров.

Особенности аморфного состояния.

**5. 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 и др. Цепочечные, слоистые и каркасные структуры.

Статистическая сумма для кристаллов. Энергия кристаллической решетки. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр.

*Идеальные и реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Статистическая сумма для кристаллов с точечными дефектами.*

Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.

**6. Общая характеристика мезофаз.** Мезофазы и методы изучения их структуры. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематерики, смектики, холестерики и др.). Жидкокристаллическое состояние в биологических системах. Практическое применение мезофаз.

**7. Методы прогнозирования свойств молекул и веществ, основанные на классической теории химического строения.** Основные положения классической теории химического строения. Молекулярные модели различного уровня в современной теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Методы расчета, базирующиеся на классической теории строения. Обоснование классической теории химического строения – подходы Бейдера и Татевского.

**8. Методы расчета структуры и физико-химических свойств веществ.** Квантово-химические методы. Метод молекулярной механики. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Вычислительный эксперимент.

*Примечание.* Разделы, указанные курсивом, предназначены для самостоятельного изучения студентами.

## ТЕМАТИКА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

1. Вычисление свойств газов на основании молекулярных и спектральных данных.
2. Межмолекулярные взаимодействия.
3. Связь между структурой и свойствами жидкостей в рамках различных теорий.
4. Свойства растворов. Контрольная работа.
5. Строение кристаллов. Энергия кристаллической решетки.
6. Характеристические температуры. Равновесия дефектов в кристалле.
7. Расчет свойств молекул и веществ на базе классической теории химического строения.
8. Методы расчета структуры молекул.
9. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.

## РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

### Основная:

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, 2003.
2. Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
3. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
4. Татевский В.М. Строение молекул и физико-химические свойства молекул и веществ. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1993.
5. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1989.

### Дополнительная:

1. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во МГУ, 1986.
2. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982.
3. Молекулярные структуры: прецизионные методы исследования. М.: Мир, 1993.
4. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высш. шк., 2000.
5. Смирнова Н.А. Молекулярные теории растворов. Л.: Химия, 1987.
6. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М.: Солон, 2005.
7. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. John Wiley & Sons, 1999.