

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям

О.Г. Прохоренко

«05» июля 2024 г.

Регистрационный № 13032 /уч.



СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

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

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

направления специальности:

1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

1-31 05 01-02 Химия (научно-педагогическая деятельность)

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

1-31 05 02 Химия лекарственных соединений

1-31 05 03 Химия высоких энергий

1-31 05 04 Фундаментальная химия

2024 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 01-2021, ОСВО 1-31 05 02-2021, ОСВО 1-31 05 03-2021, ОСВО 1-31 05 04-2021, учебных планов G31-1-005/уч., G31-1-006/уч., G-31-1-007/уч., №G31-1-008/уч., №G31-1-009/уч., №G31-1-010/уч.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Н. Е. Боборико, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

С. А. Усанов, главный научный сотрудник лаборатории белковой инженерии Государственного научного учреждения «Институт биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси», член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор.

А. В. Зураев, декан химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 11 от 31 мая 2024 г.).

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 9 от 28.06.2024 г.)

Зав.кафедрой _____

Свиридов Д.В.

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель данной учебной дисциплины – систематическое изложение закономерностей изменения строения, структуры и свойств вещества в зависимости от его химической природы, агрегатного состояния и внешних условий.

Задачи данной учебной дисциплины:

1. Расширение знаний о строении вещества, полученных студентами при изучении ряда фундаментальных дисциплин химического факультета;
2. Получение практических навыков расчетов различных физико-химических свойств веществ на основании данных по их структуре;
3. Получение практических навыков прогнозирования структуры вещества по известным значениям его физико-химических свойств;
4. Обобщение полученных знаний для более глубокого понимания фундаментальных аспектов физико-химического поведения газообразных, жидких и твердых веществ.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина «Строение вещества» для специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям) входит в модуль «Строение и исследование вещества» компонента учреждения высшего образования.

Учебная дисциплина «Строение вещества» для специальностей 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений и 1-31 05 03 Химия высоких энергий входит в модуль «Строение вещества» компонента учреждения высшего образования.

Учебная дисциплина «Строение вещества» для специальности 1-31 05 04 Фундаментальная химия входит в модуль «Строение вещества» государственного компонента.

Дисциплина «Строение вещества» использует в качестве теоретической основы содержание дисциплин «Неорганическая химия», «Квантовая химия», «Кристаллохимия», «Физическая химия».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Строение вещества» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

- по специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям):

СК Использовать понятийно-категориальный аппарат современной теории химического строения, включающей описание квантовых состояний молекул, симметрии молекулярных систем, строение конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов) для описания их электрических, магнитных и оптических свойств.

- по специальности 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений:

СК Ориентироваться в современной теории химического строения, включающей квантовые состояния молекул, симметрию молекулярных систем, их элек-

трические, магнитные и оптические свойства, в строении и структурной организации конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов).

- по специальности 1-31 05 03 Химия высоких энергий:

СК Ориентироваться в системе современных знаний о строении кристаллов и частично упорядоченных конденсированных фаз, методах получения твердых материалов с заданной структурной организацией (моно- и поликристаллические, нанокристаллические, аморфные и стеклообразные твердые тела, порошки, пленки), механизмах и кинетике реакций с участием твердых тел, особенностях химического, фазового состава и структуры твердых тел, обуславливающих их свойства и практическое применение.

- по специальности 1-31 05 04 Фундаментальная химия:

БПК Использовать понятийно-категориальный аппарат современной теории химического строения, включающий описание квантовых состояний молекул, симметрии молекулярных систем, строение конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов) для описания их электрических, магнитных и оптических свойств.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- современные представления о возникновении вещества во Вселенной;
- современные принципы разделения веществ по агрегатному состоянию;
- различие понятий «агрегатное состояние вещества» и «фаза»;
- подходы к описанию свойств идеальных и реальных газов;
- теоретические основы описания строения и электронной структуры кристаллических тел;
- современные представления о строении жидкостей и аморфных твердых тел.

уметь:

- оценивать применимость того или иного подхода к математическому описанию свойств вещества или метода прогнозирования его физико-химических свойств в различных агрегатных состояниях и при различных внешних условиях;
- на основе значений физических и физико-химических свойств веществ прогнозировать агрегатное состояние вещества и его структуру.

владеть:

- способами оценки влияния межмолекулярных взаимодействий на физические и физико-химические свойства вещества;
- методами расчета свойств веществ в рамках классической теории строения веществ;
- подходами к расчету свойств веществ с использованием методов статистической термодинамики.

Структура учебной дисциплины

Для студентов специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям) дисциплина изучается в 7 семестре.

Для студентов специальностей 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений, 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 Фундаментальная химия дисциплина изучается в 8 семестре.

Всего на изучение учебной дисциплины «Строение вещества» для студентов всех специальностей отведено:

- для очной формы получения высшего образования – 102 часа, в том числе 50 аудиторных часов, из них: лекции – 24 часа, практические занятия – 8 часов и 10 часов (ДОТ), управляемая самостоятельная работа – 8 часов.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации для студентов специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направление специальности Химия (фармацевтическая деятельность) – зачет.

Форма промежуточной аттестации для студентов специальностей 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направления специальности Химия (научно-производственная деятельность), Химия (научно-педагогическая деятельность), 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений, 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 – Фундаментальная химия – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Введение

Понятия «вещество» и «структура вещества». Современные представления о строении материи, молекул и атомов. Происхождение вещества во Вселенной. Фундаментальные взаимодействия. Переносчики взаимодействия.

Агрегатные состояния вещества и фазы, их сравнительная характеристика. Условия существования фазы. Сверхкритические фазы, их применение. Уравнения состояния для газов, жидкостей и кристаллов. Взаимосвязь между различными уравнениями состояния.

Тема 1. Межмолекулярные взаимодействия

1.1. Составляющие межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных взаимодействий на физические свойства веществ. Энергия отталкивания и энергия притяжения между молекулами. Взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Модельные потенциалы парных межмолекулярных взаимодействий. Области их применения.

Тема 2. Статистическая термодинамика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества

2.1. Понятие статистической суммы. Статистические суммы для систем и для отдельных частиц. Поступательная, вращательная, колебательная, электронная статистические суммы. Термодинамические свойства идеального газа в приближении «жесткий ротатор – гармонический осциллятор».

2.2. Функция Майера. Статистическая сумма для реального газа. Конфигурационный интеграл.

Тема 3. Строение и свойства жидкостей

3.1. Статистическая теория жидкости. Классификация жидкостей. Современные подходы для описания структуры жидкостей. Ближний порядок. Флуктуации и корреляционные функции.

3.2. Статистическая сумма для жидкости. Физические, химические, комбинированные теории жидкого состояния.

Тема 4. Строение и свойства твердых тел

4.1. Основные характеристики кристаллического состояния вещества. Дальний порядок. Анизотропия свойств. Симметрия; элементы и операции симметрии. Теория групп как математический фундамент симметрии.

4.2. Строение кристаллов. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Обратная решетка. Энергия кристаллической решетки. Колебания кристаллической решетки. Мезофазы. Жидкие кристаллы. Квазикристаллы. Метаматериалы.

4.3. Электронная структура твердых тел. Статистика Ферми-Дирака. Статистика Бозе-Эйнштейна. Характеристики электрона проводимости при его движении по энергетической зоне. Электронные дырки.

4.4. Динамика кристаллической решетки. Современная теория теплоемкости твердых тел. Диффузия. Стационарная и нестационарная диффузия. Статистическая сумма для кристалла.

Тема 5. Методы расчета, прогнозирования и экспериментального определения свойств веществ

5.1. Классификация методов расчета и прогнозирования свойств веществ по отношению к решению уравнения Шредингера. Классическая теория химического строения. Понятие аддитивности. Квантово-химическое обоснование классической теории химического строения. Методы расчета свойств, базирующиеся на классической теории химического строения. Представление химических молекул в виде графов. Топологические индексы.

5.2. Метод молекулярной механики. Метод молекулярной динамики. Метод Монте-Карло.

5.3. Общая характеристика экспериментальных методов исследования строения молекул и веществ. Спектральные и дифракционные методы изучения структуры и свойств молекул и веществ. Установление взаимосвязи структура-свойство.

5.4. Сущность методов QSAR. Понятие молекулярного дескриптора. Алгоритм построения уравнения QSAR.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная форма получения образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов						Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное	Количество часов УСР	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Введение							
	Понятия «вещество» и «структура вещества». Современные представления о строении материи, молекул и атомов. Происхождение вещества во Вселенной. Фундаментальные взаимодействия. Переносчики взаимодействия	2						
	Агрегатные состояния вещества и фазы, их сравнительная характеристика. Условия существования фазы. Сверхкритические фазы, их применение. Уравнения состояния для газов, жидкостей и кристаллов. Взаимосвязь между различными уравнениями состояния	2	2					тест
1	Тема 1. Межмолекулярные взаимодействия							
1.1	Составляющие межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных взаимодействий на физические свойства веществ. Энергия отталкивания и энергия притяжения между молекулами. Взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Модельные потенциалы парных межмолекулярных взаимодействий. Области их применения	2	2 ДОТ					коллоквиум

2	Тема 2. Статистическая термодинамика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества						
2.1	Понятие статистической суммы. Статистические суммы для систем и для отдельных частиц. Поступательная, вращательная, колебательная, электронная статистические суммы. Термодинамические свойства идеального газа в приближении «жесткий ротатор – гармонический осциллятор»	2	2				коллоквиум
2.2	Функция Майера. Статистическая сумма для реального газа. Конфигурационный интеграл	2				2	контрольная работа
3	Тема 3. Строение и свойства жидкостей						
3.1	Статистическая теория жидкости. Классификация жидкостей. Современные подходы для описания структуры жидкостей. Ближний порядок. Флуктуации и корреляционные функции	2					
3.2	Статистическая сумма для жидкости. Физические, химические, комбинированные теории жидкого состояния	2	2				контрольная работа
4	Тема 4. Строение и свойства кристаллов						
4.1	Основные характеристики кристаллического состояния вещества. Дальний порядок. Анизотропия свойств. Симметрия; элементы и операции симметрии. Теория групп как математический фундамент симметрии	1					тест
4.2	Строение кристаллов. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Обратная решетка. Энергия кристаллической решетки. Колебания кристаллической решетки. Мезофазы. Жидкие кристаллы. Квазикристаллы. Метаматериалы	1	2 ДОТ			2	коллоквиум
4.3	Электронная структура твердых тел. Статистика Ферми-Дирака. Статистика Бозе-Эйнштейна. Характеристики электрона проводимости при его движении по энергетической зоне. Электронные дырки	2	2				тест

4.4	Динамика кристаллической решетки. Современная теория теплоемкости твердых тел. Диффузия. Стационарная и нестационарная диффузия. Статистическая сумма для кристалла	2	2 ДОТ					контрольная работа
5	Тема 5. Методы расчета, прогнозирования и экспериментального определения свойств веществ							
5.1	Классификация методов расчета и прогнозирования свойств веществ по отношению к решению уравнения Шредингера. Классическая теория химического строения. Понятие аддитивности. Квантово-химическое обоснование классической теории химического строения. Методы расчета свойств, базирующиеся на классической теории химического строения. Представление химических молекул в виде графов. Топологические индексы.	1					2	тест
5.2	Метод молекулярной механики. Метод молекулярной динамики. Метод Монте-Карло	1	2 ДОТ					тест
5.3	Общая характеристика экспериментальных методов исследования строения молекул и веществ. Спектральные и дифракционные методы изучения структуры и свойств молекул и веществ. Установление взаимосвязи структура-свойство						2	реферат
5.4	Сущность методов QSAR. Понятие молекулярного дескриптора. Алгоритм построения уравнения QSAR	2	2 ДОТ					контрольная работа

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Строение и состояния вещества: Учебное пособие / Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. – СПб.: Издательство «Лань», 2021. – 236 с.
2. Частицы и атомные ядра: Учебник / Ишханов Б.С., Капитонов И.М., Юдин Н.П. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2017. – 584 с.
3. Основы физической химии: Учебник в 2-х частях / Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. – 5-е изд., перераб. и доп. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2019. – 348 с.
4. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко ; Национальная академия наук Беларуси, Институт биоорганической химии. – Минск : Беларуская навука, 2023. – 137 с.
5. Баскин, И.И. Введение в хемоинформатику: учебное пособие в 6 частях / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек — Казань : Изд-во Казанского университета, 2013-2020. - 6 ч.

Перечень дополнительной литературы

1. Строение вещества: Учебное пособие для студентов вузов по химическим специальностям / Е.В. Павлечко, Ю.С. Головкин, О.А. Ивашкевич. – Минск : Издательский центр БГУ, 2015. - 207 с.
2. Строение вещества: Учебное пособие / Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. – 2-е изд., испр. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2017. – 236 с.
3. Основы атомной физики / Барсуков О.А., Ельяшевич М.А. – М.: Научный мир, 2006. – 648 с.
4. Шрайвер, Д. Неорганическая химия: в 2-х т./ Д. Шрайвер, П.Эткинс. –М.: Мир, 2014.
5. Молекулярное моделирование: теория и практика / Хёльте Х.-Д., Зипшль В., Роньян Д., Фолькерс Г. ; пер. с англ. – 2-е изд. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. – 319 с.
6. Введение в биоинформатику / Леск А. ; пер. с англ. – 2-е изд. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 318 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Формой промежуточной аттестации учебным планом по специальностям 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направления специальности 1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность), 1-31 05 01-02 Химия (научно-педагогическая деятельность), 1-31 05 02 Химия лекарственных соединений, 1-31 05 03 Химия высоких энергий, 1-31 05 04 Фундаментальная химия предусмотрен экзамен.

Формой промежуточной аттестации учебным планом по специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям), направление специальности 1-31 05 01-03 Химия (фармацевтическая деятельность) предусмотрен зачет.

При формировании итоговой оценки используется рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации:

- выполнение тестовых заданий – 20 %;
- письменные контрольные работы по отдельным темам – 60 %;
- выполнение коллоквиумов – 10 %;
- написание реферата – 10 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе отметки текущей аттестации - 40 %, и экзаменационной отметки – 60 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 3.2. Функция Майера. Статистическая сумма для реального газа. Конфигурационный интеграл (2ч.)

Выполнение заданий по расчету различных вкладов движения в статистическую сумму для идеального и реального газа.

(Форма контроля – контрольная работа).

Тема 4.2. Строение кристаллов. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Обратная решетка. Энергия кристаллической решетки. Колебания кристаллической решетки. Мезофазы. Жидкие кристаллы. Квазикристаллы. Метаматериалы (2ч.)

Выполнение заданий коллоквиума по определению точечной группы симметрии кристалла, расчету энергии кристаллической решетки, особенностях описания структуры жидких кристаллов, квазикристаллов, метаматериалов.

(Форма контроля – коллоквиум).

Тема 5.1. Классификация методов расчета и прогнозирования свойств веществ по отношению к решению уравнения Шредингера. Классическая теория химического строения. Понятие аддитивности. Квантово-химическое обоснование классической теории химического строения. Методы расчета свойств, базирующиеся на классической теории химического строения. Представление химических молекул в виде графов. Топологические индексы. (2ч.)

Выполнение заданий по составлению молекулярных графов, расчету из них топологических индексов и выявлению закономерностей изменения реальных физических свойств веществ на основе значений топологических индексов их молекул.

(Форма контроля – тест).

Тема 5.3. Общая характеристика экспериментальных методов исследования строения молекул и веществ. Спектральные методы изучения структуры и свойств молекул и веществ. Дифракционные методы изучения структуры и свойств молекул и веществ. Установление взаимосвязи структура-свойство (2ч.)

Подготовка реферата на выбранную тему.

(Форма контроля – реферат).

Примерная тематика практических занятий

Практическое занятие №1. Уравнения состояния для газов, жидкостей и кристаллов.

Практическое занятие №2. Модельные потенциалы парных межмолекулярных взаимодействий.

Практическое занятие №3. Поступательная, вращательная, колебательная, электронная статистические суммы.

Практическое занятие №4. Физические, химические, комбинированные теории жидкого состояния.

Практическое занятие №5. Энергия кристаллической решетки.

Практическое занятие №6. Характеристики электрона проводимости при его движении по энергетической зоне. Электронные дырки.

Практическое занятие №7. Современная теория теплоемкости твердых тел.

Практическое занятие №8. Метод молекулярной механики.

Практическое занятие №9. Построение уравнения QSAR.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется **практико-ориентированный подход**, который предполагает:

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;
- использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

При организации образовательного процесса также используется **метод учебной дискуссии**, который предполагает участие студентов в целенаправленном обмене мнениями, идеями для предъявления и/или согласования существующих позиций по определенной проблеме.

Использование метода обеспечивает появление нового уровня понимания изучаемой темы, применение знаний (теорий, концепций) при решении проблем, определение способов их решения.

Помимо этого, при организации образовательного процесса **используются методы и приемы развития критического мышления**, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимании информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине используются современные информационные ресурсы: на образовательном портале educhem.bsu.by размещен комплекс учебных и учебно-методических материалов (учебно-программные материалы, материалы текущего контроля и текущей аттестации, позволяющие определить соответствие учебной деятельности обучающихся требованиям образовательных стандартов высшего образования и учебно-программной документации, в т.ч. вопросы для подготовки к экзамену и зачету, задания, тесты, вопросы для самоконтроля, список рекомендуемой литературы, информационных ресурсов).

Одной из форм контроля знаний при изучении дисциплины «Строение вещества» является написание и представление реферата. Примерные темы рефератов представлены ниже.

Примерные темы рефератов

1. Анализ изотерм Ван-дер-Ваальса: физический смысл корней уравнения Ван-дер-Ваальса, области применимости уравнения Ван-дер-Ваальса.
2. Метастабильные фазы: условия образования и свойства.
3. Исторический анализ развития идей статистической термодинамики.
4. Применение статистической термодинамики для описания изолированных, закрытых и открытых термодинамических систем.
5. Влияние межмолекулярных взаимодействий на физические и химические свойства вещества.
6. Исследование межмолекулярных взаимодействий в веществе дифракционными методами.
7. Исследование межмолекулярных взаимодействий в веществе спектральными методами.
8. Сравнение применимости модельных потенциалов Морзе и Леннарда-Джонса для описания межмолекулярных взаимодействий.
9. Потенциал прямоугольной ямы для описания межмолекулярных взаимодействий: границы применимости, примеры эффективного практического использования.
10. Потенциал жестких сфер для описания межмолекулярных взаимодействий: границы применимости, примеры эффективного практического использования.
11. Водородная связь как особый тип межмолекулярного взаимодействия.
12. Описание свойств растворов высокомолекулярных соединений с помощью химических теорий жидкого состояния.
13. Преимущества и недостатки физических теорий жидкого состояния. Примеры практического использования.
14. Современные методы определения энергии кристаллической решетки веществ.
15. Квазикристаллы. Исторический анализ публикаций по получению и применению.
16. Многомерное описание структуры квазикристаллов.
17. Сравнение методов молекулярной механики и молекулярной динамики.
18. Квантовохимические методы. Исторический анализ областей применимости.
19. Квантовохимические методы. Основные ограничения и недостатки.
20. Молекулярные графы реакций. Конденсированный граф реакции.
21. Использование машинного обучения в химии: преимущества и недостатки.
22. Подготовка данных для построения модели машинного обучения.
23. Искусственные нейронные сети и глубокое обучение для решения химических задач.
24. Оценка и улучшение качества моделей машинного обучения. Перекрестная проверка и решетчатый поиск.
25. Метрики качества моделей машинного обучения. Оценка области применимости модели машинного обучения.

26. Топологические индексы: расчет и использование для предсказания свойств химических веществ.
27. Форматы хранения данных в компьютерной химии.
28. Связь представления молекулы в виде молекулярного графа с основными форматами хранения данных в прогнозировании свойств.
29. Примеры успешного применения методов прогнозирования свойств веществ при разработке химических соединений с заданными типами активности.
30. Использование языка программирования python для решения задач машинного обучения в химии.
31. Темы, предложенные студентами.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Современные представления о строении материи.
2. Фундаментальные взаимодействия. Переносчики взаимодействия.
3. Вещество. Образование атомов во Вселенной.
4. Сравнительная характеристика агрегатных состояний.
5. Агрегатное состояние вещества и фаза. Условия существования фазы. Условие равновесия фаз.
6. Сверхкритическое состояние вещества: положение на фазовой диаграмме, особенности свойств, области применения.
7. Уравнения состояния для газов, жидкостей, кристаллов.
8. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. Связь параметров уравнения Ван-дер-Ваальса с критическими параметрами.
9. Связь параметров уравнения Ван-дер-Ваальса с вириальными коэффициентами.
10. Межмолекулярные взаимодействия. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ.
11. Взаимодействия Ван-дер-Ваальса (индукционное, дисперсионное, ориентационное).
12. Модельные потенциалы межмолекулярных взаимодействий, области их применения.
13. Водородная связь. Влияние водородной связи на свойства вещества.
14. Статистическая термодинамика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества.
15. Статистическая сумма. Связь внутренней энергии, энергии Гельмгольца, энтропии, давления со статистической суммой системы.
16. Статистическая сумма молекулы. Вклады различных видов движения в статистическую сумму молекулы.
17. Статистическая сумма реального газа. Конфигурационный интеграл.
18. Функция Майера. Уравнение состояния реального газа с позиций статистической термодинамики.
19. Структура жидкостей и растворов. Статистическая теория жидкости.

20. Классификации жидкостей. Экспериментальные методы исследования структуры жидкостей.
21. Общая характеристика теорий жидкого состояния.
22. Физические теории жидкого состояния.
23. Химические теории жидкого состояния. Теория свободного объема.
24. Химические теории жидкого состояния. Решеточная и дырочная теории.
25. Подходы к описанию жидкостей с помощью комбинированных моделей.
26. Основные характеристики кристаллического состояния вещества.
27. Теория групп как математический фундамент симметрии.
28. Строение кристаллов. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
29. Ячейка Вигнера-Зейтца. Обратная решетка.
30. Волновая функция электрона в кристалле. Параболический закон дисперсии.
31. Квазикристаллы.
32. Электронная структура твердых тел.
33. Особенности электронного строения металлов, диэлектриков, полупроводников.
34. Электронные свойства твердых тел. Электроны проводимости.
35. Характеристики электрона проводимости при его движении по энергетической зоне: скорость, масса, заряд. Электронные дырки.
36. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр. Формирование акустической и оптической ветви в фононном спектре.
37. Энергия кристаллической решетки молекулярных кристаллов. Методы ее экспериментального определения и расчета.
38. Энергия кристаллической решетки ионных кристаллов. Методы ее экспериментального определения и расчета.
39. Статистическая сумма для кристаллов.
40. Основные положения классической теории химического строения. Аддитивность. Квантово-химическое обоснование классической теории строения.
41. Методы расчета свойств веществ, базирующиеся на классической теории строения.
42. Метод молекулярной механики.
43. Метод молекулярной динамики.
44. Метод Монте-Карло.
45. Представление молекул в виде графов. Матрица смежности, матрица расстояния, матрица инцидентности, матрица связей.
46. Топологические индексы. Индекс Винера, индекс Рандича. Способы расчета и связь со свойствами вещества.
47. Методы QSAR. Сущность методов.
48. Понятие молекулярного дескриптора.
49. Алгоритм построения уравнения QSAR.

Примерный перечень вопросов к экзамену

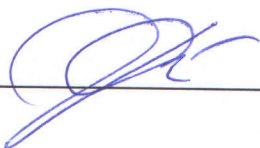
1. Современные представления о строении материи.
2. Фундаментальные взаимодействия. Переносчики взаимодействия.
3. Вещество. Образование атомов во Вселенной.
4. Сравнительная характеристика агрегатных состояний.
5. Агрегатное состояние вещества и фаза. Условия существования фазы. Условия равновесия фаз.
6. Сверхкритическое состояние вещества: положение на фазовой диаграмме, особенности свойств, области применения.
7. Уравнения состояния для газов, жидкостей, кристаллов.
8. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. Связь параметров уравнения Ван-дер-Ваальса с критическими параметрами.
9. Связь параметров уравнения Ван-дер-Ваальса с вириальными коэффициентами.
10. Межмолекулярные взаимодействия. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ.
11. Взаимодействия Ван-дер-Ваальса (индукционное, дисперсионное, ориентационное).
12. Модельные потенциалы межмолекулярных взаимодействий, области их применения.
13. Водородная связь. Влияние водородной связи на свойства вещества.
14. Статистическая термодинамика как способ связи свойств молекул со свойствами вещества.
15. Статистическая сумма. Связь внутренней энергии, энергии Гельмгольца, энтропии, давления со статистической суммой системы.
16. Статистическая сумма молекулы. Вклады различных видов движения в статистическую сумму молекулы.
17. Статистическая сумма реального газа. Конфигурационный интеграл.
18. Функция Майера. Уравнение состояния реального газа с позиций статистической термодинамики.
19. Структура жидкостей и растворов. Статистическая теория жидкости.
20. Классификации жидкостей. Экспериментальные методы исследования структуры жидкостей.
21. Общая характеристика теорий жидкого состояния.
22. Физические теории жидкого состояния.
23. Химические теории жидкого состояния. Теория свободного объема.
24. Химические теории жидкого состояния. Решеточная и дырочная теории.
25. Подходы к описанию жидкостей с помощью комбинированных моделей.
26. Основные характеристики кристаллического состояния вещества.
27. Теория групп как математический фундамент симметрии.
28. Строение кристаллов. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
29. Ячейка Вигнера-Зейтца. Обратная решетка.
30. Уравнение Шредингера для кристалла.

31. Волновая функция электрона в кристалле. Параболический закон дисперсии.
32. Квазикристаллы.
33. Метаматериалы.
34. Электронная структура твердых тел. Подходы для описания образования энергетических зон в кристалле. Приближение сильно связанных электронов.
35. Электронная структура твердых тел. Подходы для описания образования энергетических зон в кристалле. Модель квазисвободных электронов.
36. Особенности электронного строения металлов, диэлектриков, полупроводников.
37. Статистика Ферми-Дирака. Уровень Ферми.
38. Статистика Бозе-Эйнштейна. Конденсат Бозе-Эйнштейна.
39. Электронные свойства твердых тел. Электроны проводимости.
40. Характеристики электрона проводимости при его движении по энергетической зоне: скорость, масса, заряд. Электронные дырки.
41. Собственное (фундаментальное) поглощение твердых тел. Экситоны.
42. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр. Формирование акустической и оптической ветви в фононном спектре.
43. Фонон. Взаимодействие фононов. Электрон-фононное взаимодействие в полярных кристаллах. Свойства кристаллов, определяемые фононами.
44. Модель Эйнштейна и модель Дебая для описания температурных зависимостей свойств кристалла.
45. Энергия кристаллической решетки молекулярных кристаллов. Методы ее экспериментального определения и расчета.
46. Энергия кристаллической решетки ионных кристаллов. Методы ее экспериментального определения и расчета.
47. Статистическая сумма для кристаллов.
48. Диффузия. Стационарная и нестационарная диффузия. Уравнение диффузии.
49. Основные положения классической теории химического строения. Аддитивность. Квантово-химическое обоснование классической теории строения.
50. Методы расчета свойств веществ, базирующиеся на классической теории строения.
51. Метод молекулярной механики.
52. Метод молекулярной динамики.
53. Метод Монте-Карло.
54. Представление молекул в виде графов. Матрица смежности, матрица расстояния, матрица инцидентности, матрица связей.
55. Топологические индексы. Индекс Винера, индекс Рандича. Способы расчета и связь со свойствами вещества.
56. Методы QSAR. Сущность методов.
57. Понятие молекулярного дескриптора.
58. Алгоритм построения уравнения QSAR.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Фундаментальные проблемы химии	Неорганической химии	Изменений не требуется	
Химия твердого тела	Неорганической химии	Изменений не требуется	
Теоретические основы неорганической химии	Неорганической химии	Изменений не требуется	

Заведующий кафедрой
неорганической химии
член-корреспондент НАН Беларуси
д.х.н., профессор



Д.В.Свиридов

«31» мая 2024 г.

**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

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета
