

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания для самостоятельной работы

По дисциплине: Б1.О.03.03 Строение вещества

для направления подготовки: 04.04.01 Химия

направленность: Физическая и коллоидная химия

**Квалификация выпускника, уровень подготовки:
магистр**

Кафедра-разработчик: кафедра химии

Составитель - Путинцев Николай Михайлович, д.ф.-м.наук, профессор, профессор кафедры химии.

Методические указания рассмотрены и одобрены на заседании кафедры химии.

ОГЛАВЛЕНИЕ

I. Общие организационно-методические указания

II. Темы самостоятельной работы

III. Список рекомендуемой литературы

IV. Методические рекомендации по темам самостоятельной работы

I. ОБЩИЕ ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Целью дисциплины «Строение вещества» является формирование компетенций в соответствии с квалификационной характеристикой магистра и учебным планом для направления подготовки «04.04.01 Химия».

Задачи дисциплины: дать необходимые теоретические знания, практические умения и навыки по основам физической химии (строению вещества), позволяющие успешно использовать их в профессиональной деятельности.

В результате изучения дисциплины магистр направления подготовки «04.04.01 Химия» должен:

Знать: - основные положения физической химии: основы межмолекулярного взаимодействия и строение вещества, типы кристаллических решеток молекулярных систем, структурные особенности жидкого состояния, а также физические особенности наноструктурных частиц.

Уметь:

- применять физические законы для исследования физических и химических явлений, прогнозировать физические и структурные свойства различных молекулярных систем в кристаллическом, жидком и газообразном состояниях, проводить расчеты энергетических и структурных параметров вещества (рассчитывать равновесные межмолекулярные расстояния, число ближайших соседей, критическую температуру, поляризованность молекул, диэлектрическую проницаемость и т.д.); использовать свойства молекулярных систем при решении профессиональных задач; использовать основные приемы обработки экспериментальных данных.

Владеть:

- методами обработки экспериментальных данных по определению структурных параметров вещества из радиальных функций распределения (ФРР), навыками системного анализа и поиска информации, необходимой для решения практических задач, связанных с исследовательской работой.

Формы промежуточной аттестации:

семестр 2 – экзамен

Содержание разделов дисциплины: Введение. Эволюция Вселенной. Вещество и поле. Структурные свойства вещества. Межмолекулярное взаимодействие и его составляющие. Термодинамика межмолекулярного взаимодействия. Структура кристаллов. Структурные свойства газового состояния. Реальный газ. Структурные и физические свойства простых жидкостей. Энергия эффективного парного потенциала. Структурные и физические свойства полярных жидкостей. Вода (тепловое расширение и коэффициент упаковки молекул в жидком состоянии). Интерпретация процесса нагревания простых жидкостей и воды. Критическое состояние вещества.

II. ПЕРЕЧЕНЬ ТЕМ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Перечень тем самостоятельной работы

№ п/п	Наименование тем самостоятельной работы
1	Структурные свойства вещества.
2	Межмолекулярное взаимодействие и его составляющие. Термодинамика межмолекулярного взаимодействия.
3	Структура кристаллов.
4.	Структурные свойства газового состояния. Реальный газ.
5.	Структурные и физические свойства простых жидкостей. Энергия эффективного парного потенциала.
6.	Структурные и физические свойства полярных жидкостей. Вода (тепловое расширение и коэффициент упаковки молекул в жидком состоянии).
7.	Интерпретация процесса нагревания простых жидкостей и воды.
8.	Критическое состояние вещества.

III СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Основная литература

1. Путинцев, Н. М. Физические свойства вещества (лед, вода, пар) / Н. М. Путинцев; Ком. Рос. Федерации по рыболовству ; МГАРФ. - Мурманск : Изд-во МГАРФ, 1995. - 255 с. (375 экз. библи. МГТУ)
2. Путинцев, Н. М. Классическая теория поляризации молекулярных систем / Н. М. Путинцев, Д. Н. Путинцев. - Москва : Физматлит, 2011. - 176 с. (3 экз. библи. МГТУ)
3. Путинцев, Н. М. Практикум по физической химии : учеб. пособие / Н. М. Путинцев, Н. Г. Воронько; Федер. агентство по рыболовству, Мурман. гос. техн. ун-т. - Мурманск : Изд-во МГТУ, 2008. - 118 с. : ил. - Имеется электрон. аналог 2008 г. - Библиогр.: 118 с. (93 экз библи. МГТУ)
4. Физическая химия : учебник для вузов. В 2 кн. Кн. 1. Строение вещества. Термодинамика / К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев [и др.] ; под ред. К. С. Краснова. - 3-е изд., испр. - Москва : Высш. шк., 2001. - 512 с. (29 экз. библи. МГТУ)

Дополнительная литература:

1. Спектроскопические методы анализа (молекулярная спектроскопия) : практикум : учеб. пособие для вузов / Г. И. Берестова [и др.]; Федер. агентство по рыболовству, ФГБОУ ВПО "Мурман. гос. техн. ун-т" . - Мурманск : Изд-во МГТУ, 2014. - 192 с. : ил. - Имеется электрон. аналог 2014 г. - Библиогр.: с. 192. (100 экз библи. МГТУ)
2. Практикум по физической химии. Термодинамика : учеб. пособие для вузов / [Е. П. Агеев и др.] ; под ред. Е. П. Агеева, В. В. Лунина. - Москва : Академия, 2010. - 218 с. (15 экз. библи. МГТУ)

IV СОДЕРЖАНИЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ИЗУЧЕНИЮ ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Тема: Введение. Эволюция Вселенной. Вещество и поле.

Происхождение и развитие Вселенной. Химическая эволюция материи. Простые и сложные вещества (химические элементы, молекулы, ионы). Химические и ядерные реакции. Размерные эффекты. Нанохимия. Содержание понятий "Строение вещества" и "Структура вещества. Состояния материи (вещество, поле).

Требования к уровню освоения содержания темы**Изучив данную тему, студент должен:****знать:**

Структурные элементы Вселенной. Иметь представление об аннигиляции и синтезе элементарных частиц.

уметь:

проводить оценку энергетических характеристик материи для перехода вещества в поле и наоборот.

Порядок и методические указания по изучению темы:**При изучении темы необходимо:**

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Приведите примеры структурных элементов Вселенной.
2. Дайте понятие «Большого Взрыва».
3. Что такое сингулярность?
4. Классификация видов материи
5. В яем заключается двойственность состояния вещества?
6. Приведите примеры аннигиляции вещества.

Тема: Структурные свойства вещества

Различные аспекты термина "Строение молекул": геометрические модели молекул, электронное строение атомов и молекул, Величины, определяющие геометрическую конфигурацию молекулы: межъядерные расстояния, валентные углы. Общий обзор методов экспериментального и теоретического изучения строения молекул и строения вещества: спектроскопический метод, рентгеноструктурный, нейтронографический, электронографический анализы.

Требования к уровню освоения содержания темы**Изучив данную тему, студент должен:**

Знать физические основы методов рентгенографии, электронографии, нейтронографии; исследования структуры кристаллического, жидкого и аморфного состояния вещества; типы кристаллографических систем.

иметь представление о строении простых и сложных молекулярных системах, о функциях радиального распределения молекулярной плотности и межатомных расстояний.

уметь в соответствии с экспериментальными методами исследования определять структурные параметры вещества.

Порядок и методические указания по изучению темы:**При изучении темы необходимо:**

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Какие типы кристаллов встречаются в природе ?
2. Что называется электронной конфигурацией атомов и молекул?
3. Какие физические свойства вещества используются в экспериментальных методах исследования вещества?
4. Чем отличается электронная оболочка атома неона от атома натрия?
5. Что определяет главное квантовое число атома?
6. Чем отличаются многоэлектронные атомы от молекул?

7. Запишите электронную конфигурацию атома углерода.
8. Что является структурными частицами атомов и молекул?
9. Что называется координационным числом структурной частицы?
10. Что позволяют определять максимумы радиальных функций (РФР)?

Тема: Межмолекулярное взаимодействие и его составляющие. Термодинамика межмолекулярного взаимодействия.

Основные составляющие межмолекулярного взаимодействия: электростатическое (индукционное и дисперсионное взаимодействия), обменное отталкивание. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия (потенциал Леннарда-Джонса, потенциал Морзе и т.д.). Определение параметров потенциала Леннарда-Джонса. Эффективный парный потенциал. Энергия эффективного парного потенциала и ее составляющие (внутренняя энергия взаимодействия и нулевая энергия). Использование межмолекулярных потенциалов для расчета структурных и энергетических свойств вещества.

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

знать составляющие межмолекулярного взаимодействия; природу зависимости межмолекулярного взаимодействия от условий среды, виды потенциалов межмолекулярного взаимодействия; способы нахождения параметров межмолекулярных потенциалов.

иметь представление о взаимосвязи межмолекулярного взаимодействия со структурой вещества; о критериях, определяющих кристаллическое, жидкое и газообразное состояния.

уметь определять энергию составляющих межмолекулярного взаимодействия и рассчитывать структурные и энергетические свойства молекулярных систем.

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Приведите составляющие межмолекулярного взаимодействия.
2. Какие составляющие межмолекулярного взаимодействия относятся к дальнедействующим, а какие – к короткодействующим?.
3. Назовите составляющие электростатического взаимодействия.
4. Запишите формулу дисперсионного взаимодействия.
5. Запишите математическое выражение потенциала Леннарда-Джонса..
6. Дайте определение дипольного момента молекулы.
7. Чем отличается постоянный дипольный момент молекулы от деформационного (индукционного).
8. В каких единицах измеряется дипольный момент молекулы в международной и гауссовой системах?
9. Что характеризует поляризуемость частицы и в каких единицах в СИ измеряется?.
10. Что представляет собой термодинамика межмолекулярного взаимодействия (ТМВ)?
11. Какие термодинамические функции называются функциями взаимодействия и как они определяются?
12. Что представляет собой внутренняя энергия взаимодействия?

Тема. Структура кристаллов

Симметрия молекулярных систем. Операции симметрии. Точечные группы симметрии.

Атомные, молекулярные и ионные кристаллы. Энергия кристаллической решетки, энергия

связи структурных частиц, энергия нулевых колебаний. Коэффициент упаковки молекул в кристаллах.

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

знать классификацию структурных частиц кристаллов, строение кристаллической решетки, типы кристаллографических систем, элементы симметрии, типы структурных частиц кристаллов, определения энергии кристаллической решетки, энергию связи структурных частиц, определение термина «число ближайших соседей» структурной частицы, различные определения коэффициента упаковки частиц в кристалле;

уметь оценить природу химической связи структурных частиц в кристаллах, определять межмолекулярные расстояния из кривых радиального распределения молекул и межмолекулярных расстояний, а также из математических формул коэффициента упаковки частиц.

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Что подразумевается под термином «кристаллическая решетка»?
2. Какие типы кристаллических решеток Вы знаете?
3. Что представляет собой первая структурная оболочка или координационная сфера?
4. Сколько структурных частиц входит в гранцентрированную кубическую (ГЦК)?
5. Сколько структурных частиц входит в гексагональную плотнейшую структуру (ГПУ) ?
6. Сколько структурных частиц содержит первая координационная оболочка гексагонального льда (Ih) ?

Тема. Структурные свойства газового состояния. Реальный газ

Уравнения состояния идеального и реального газов. Теорема вириала. Структурные характеристики реального газа (кластерные образования).

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

знать уравнение состояния идеального газа, основные виды уравнений состояния реального газа (Ван-дер-Ваалса, Камерлинг-Оннеса и т.д.), теорему вириала, метод прогнозирования PVT -данных насыщенного газа.

уметь определять величину второго вириального коэффициента, величину вириала межмолекулярных сил, величину максимума произведения давления на объем насыщенного газа; оценивать величину критической температуры вещества.

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Назовите фазовые состояния вещества.
2. Что называется идеальным газом?
3. Приведите энергетический критерий газового состояния вещества.
4. Можно ли говорить о структуре газового состояния вещества?
5. Какие виды структурных образований могут существовать в реальном газе?
6. Сколько структурных частиц имеет критическое состояния простых веществ?
7. Что определяют поправки Ван-дер-Ваальса ?
8. Назовите причину, по которой неизвестно строгое уравнение состояния реального газа.
9. Назовите основные структурные частицы разреженного газа.

Тема: Структурные и физические свойства простых жидкостей. Энергия эффективного парного потенциала

Содержание понятия "Структура жидкости": мгновенная, колебательно-усредненная, диффузионная. Функции радиального распределения (РФР) молекулярной плотности и межмолекулярных расстояний. Коэффициент упаковки в жидкости. Методы определения числа ближайших соседей структурной частицы.

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

Знать структурные характеристики вещества (радиальные функции распределения, число ближайших соседей структурных частиц, способы определения числа ближайших соседей и межмолекулярных расстояний в простых жидкостях, формулу коэффициента упаковки молекул; выражения, связывающие энергию эффективного парного потенциала с критической температурой и энергией плавления кристалла; понятия внутренней энергии взаимодействия и энергии нулевых колебаний;

уметь оценивать величину внутренней энергии взаимодействия, энергию нулевых колебаний, число ближайших соседей молекул и межмолекулярные расстояния в простых жидкостях.

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Какие жидкости называют «простыми»?
2. Запишите выражение для коэффициента упаковки молекул в простых жидкостях.
3. Чем отличается энергия межмолекулярного взаимодействия от полной энергии взаимодействия молекул?
4. Чем отличается величина энергии эффективного парного потенциала от энергии истинного (двучастичного) парного потенциала?
5. Зависит ли энергия нулевых колебаний вещества (жидкости, кристалла) от условий среды (температуры и давления)?
6. Как можно оценить величину внутренней энергии взаимодействия в простых жидкостях?

Тема: Структурные и физические свойства полярных жидкостей.

Ассоциированные жидкости (вода, спирты, азот, нитрилы и т.д.). Вода (тепловое расширение и коэффициент упаковки молекул в жидком состоянии).

«Аномальные» свойства воды.

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

знать составляющие межмолекулярного взаимодействия в полярных жидкостях, метод определения коэффициента теплового расширения жидкости; составляющие коэффициента теплового расширения воды, метод оценки величины коэффициента упаковки молекул в ассоциированных жидкостях;

уметь рассчитывать величину внутренней энергии взаимодействия полярных жидкостей (воды, спиртов и др.), составляющие коэффициента теплового расширения воды, коэффициент упаковки молеку; оценивать величину поляризационной составляющей внутренней энергии взаимодействия воды.

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Что подразумевается под понятием "водородная связь" в воде?

2. Какие заряды называются «эффективными» или избыточными зарядами атомов $\pm\delta$?
3. Как обычно оценивается величина эффективного (избыточного) заряда атома водорода в мономерной молекуле воды?
4. Что называется изотермическим коэффициентом теплового расширения вещества?
5. Имеет ли отношение величина коэффициента упаковки молекул в структуре льда Ih к явлению отрицательного теплового расширения?
6. В каких веществах, кроме воды, у коэффициента теплового расширения может иметь место конфигурационная составляющая?
Как можно определить величину среднего расстояния между молекулами в жидкой воде?

Тема: Интерпретация процесса нагревания простых жидкостей и воды.

Особенности процесса нагревания простых жидкостей (благородных газов). Процесс нагревания воды. Точки подобия жидкого состояния.

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

знать фазовые состояния вещества и виды фазовых переходов, определения внутренней энергии и энтальпии вещества, энергии плавления, парообразования и сублимации, определения теплоемкости и теплоемкости взаимодействия вещества; структурные особенности жидкого ${}^4\text{He}$;

иметь представления о диаграмме состояния вещества; о процессах плавления и нагревания простых и сложных веществах (об изменениях числа ближайших соседей структурных частиц, внутренней энергии взаимодействия и нулевой энергии); о влиянии волновых свойств вещества на его структурные и физические свойства; о псевдофазовых превращениях в жидком состоянии вдоль линии насыщения.

уметь оценивать величину внутренней энергии взаимодействия простых веществ и величину критической температуры (по величине $(PV)_S$ газов).

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Приведите фазовых переходов (превращений) вещества. Приведите структурные формулы всех изомерных одноосновных монооксикислот с четырьмя валентными атомами в составе молекулы. Назовите эти оксикислоты а) по систематической номенклатуре б) рассматривая их как производные масляной или изомасляной кислот.
2. Какие термодинамические функции и параметры вещества изменяются скачкообразно в процессе фазовых переходов первого рода?
3. Назовите структурные особенности кристаллического ${}^4\text{He}$.
4. Чем отличается фазовый переход лед ($Ih \rightarrow$ вода) от перехода аргон кристаллический \rightarrow аргон жидкий?
5. Назовите особые точки жидкого состояния вещества.
6. Какие температуры могут считаться «универсальными точками подобия» вещества?
7. Что представляет собой λ -переход в жидком ${}^4\text{He}$?
8. Чем отличается бозе-конденсация в ${}^4\text{He}$ от обычного фазового перехода первого рода?
9. Что представляет собой λ -переход в жидком ${}^4\text{He}$?

Тема: Критическое состояние вещества.

Структурные и термодинамические характеристики вещества в критическом состоянии.

Требования к уровню освоения содержания темы

Изучив данную тему, студент должен:

знать виды агрегатных состояний вещества, диаграмму состояния воды, определения критического состояния вещества и «абсолютной температуры кипения»;

иметь представления о критериях устойчивости молекулярных систем, о величине структурных параметров вещества в критическом состоянии (числе ближайших соседей, коэффициенте упаковки, межмолекулярном рассеянии);

уметь определять величину критической температуры вещества по величине произведения $(PV)_S$ газа.

Порядок и методические указания по изучению темы:

При изучении темы необходимо:

Изучить материалы учебников (учебных пособий)

Ответить на вопросы для самоконтроля по теме.

Вопросы для самоконтроля:

1. Какое состояние называется критическим состоянием вещества?
2. Чему равна энтальпия парообразования в критическом состоянии вещества?
3. Приведите соотношение, определяющее энергетический критерий критического состояния вещества.
4. Чем отличается температура кипения от «абсолютной температуры кипения» вещества?