

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

образовательная программа направления 020100.62 Химия
цикл дисциплины направления, вариативная часть

Цели и задачи изучения дисциплины

Цель дисциплины – изучение фундаментальных понятий современной теории химического строения молекул, жидкостей, аморфных веществ, мезофаз и кристаллов.

Задачи дисциплины:

- разъяснить суть фундаментальных понятий и представлений современной теории химического строения молекул, жидкостей, аморфных веществ, мезофаз и кристаллов.
- раскрыть роль симметрии при анализе строения молекул и их важнейших свойств;
- рассмотреть основные методы определения электронной и пространственной структуры молекул;
- продемонстрировать возможности теории химического строения для выявления и прогнозирования взаимосвязей между химическим составом, строением и свойствами веществ на молекулярном, супрамолекулярном, жидком и кристаллическом уровнях организации их структуры.

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Иметь представление:

- о фундаментальных понятиях и представлениях современной теории химического строения молекул, жидкостей, аморфных веществ, мезофаз и кристаллов.

Знать:

- важнейшие теоретические модели и методы, используемые в химии для определения и анализа пространственной и электронной структуры молекул, жидкостей, аморфных веществ, мезофаз и кристаллов;
- взаимосвязи между симметрией молекулярных систем, их электрическими и магнитными свойствами, а также основные составляющие межмолекулярных взаимодействий;
- зависимости между строением и важнейшими физико-химическими свойствами жидкостей, аморфных веществ, мезофаз и кристаллов.

Уметь:

- использовать сведения о симметрии молекул и кристаллов при анализе взаимосвязей между их строением и важнейшими физико-химическими свойствами;
- применять фундаментальные понятия и модели современной теории строения вещества при физико-химическом исследовании химических веществ на разных уровнях организации их структуры.

Быть способным:

- использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания о строении вещества.
- использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач.

6 семестр, экзамен

Всего часов 100, аудиторных 50

Краткое содержание

РАЗДЕЛ 1. СТРОЕНИЕ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

Основы современной теории химического строения химических частиц. Модель молекулы как единой динамической системы из ядер и электронов. Симметрия равновесных геометрических конфигураций молекулярных систем. Точечные группы симметрии молекул и их обо-

значения. Правила определения симметрии молекул и их ориентации в декартовой системе координат. Влияние симметрии молекул на их полярность и оптическую активность. Симметрия поступательного и вращательного движения молекул. Неприводимые представления, их обозначения. Таблицы характеров. Применение теории групп для анализа симметрии атомных и молекулярных орбиталей. Основные принципы построения и интерпретации диаграмм энергетических уровней молекулярных орбиталей многоатомных молекул типа AH_2 (симметрии C_{2v} или $\text{D}_{\infty h}$), AH_3 (C_{3v} или D_{3h}), AH_4 (T_d или D_{4h}). Граничные молекулярные орбитали. Влияние электронного строения молекул на их электронодонорные и электроноакцепторные характеристики, магнитные и химические свойства. Теория ОВЭП. Диаграммы Уолша. Электронная структура молекул SF_4 , PF_5 и гипотетических SH_4 и PH_5 . Особенности построения диаграмм энергетических уровней молекулярных орбиталей молекул озона, этилена, этана. Основные экспериментальные методы определения электронной структуры молекул – фотоэлектронная, рентгеноэлектронная и рентгеновская спектроскопия. Теорема Купманса. Поверхности потенциальной энергии молекул. Колебания молекул. Симметрия нормальных колебаний многоатомных молекул, методы ее определения. Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный дипольный момент и поляризуемость молекул. Тензор поляризуемости. Правила отбора для ИК- и КР-спектров. Определение геометрической конфигурации молекул на основе данных о симметрии нормальных колебаний и компонент тензора поляризуемости.

РАЗДЕЛ 2. СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Основные особенности строения координационных соединений. Электронное строение октаэдрических и тетраэдрических комплексов переходных металлов. Влияние природы и электронного строения лигандов на электронную структуру комплексов. Важнейшие особенности электронного строения π -комплексов и кластерных соединений. Правило 18 электронов. “Магические” числа для простейших типов кластеров переходных металлов. Правило $14n+2$. Основные различия строения хлоридных и карбонильных кластеров переходных металлов. Структурно нежесткие молекулы. Основные типы структурной нежесткости молекул – вращение вокруг σ -связей, политопные перегруппировки, таутомерные перегруппировки, изомеризация π -комплексов. Электронные переходы в многоатомных молекулах, правила отбора. Эффект Яна-Теллера. Определение геометрической конфигурации молекул с помощью правила Пирсона. Методы исследования структурно нежестких молекул. Электронная природа структурной нежесткости молекул. Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях. Использование данных о симметрии граничных МО для определения механизма согласованных химических реакций на примере превращения этилена в циклобутан, циклобутена в бутадиев. Корреляционные диаграммы.

РАЗДЕЛ 3. СТРОЕНИЕ ЖИДКОСТЕЙ, ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Основные особенности строения жидкостей и аморфных веществ. Функция радиального распределения. Основные типы сил межмолекулярного взаимодействия. Мезоморфные фазовые состояния вещества. Строение жидких кристаллов. Нематические, холестерические, смектические и дискотические жидкие кристаллы. Газокристаллы, основные особенности их структуры. Основные понятия и представления супрамолекулярной химии. Электронное строение кристаллических веществ. Основные понятия зонной теории. Волновой вектор, зоны Бриллюэна, сфера Ферми, уровень Ферми, функция плотности состояний. Важнейшие особенности зонной структуры металлов, ионных и ковалентных кристаллов на примере Na , Cu , Fe , NaCl , MgO , TiO , NiO , Al_2O_3 , WO_3 и ReO_3 . Влияние примесей на зонную структуру, электрофизические и спектроскопические свойства полупроводников и диэлектриков. Твердотельные лазеры. Сверхпроводимость. Высокотемпературные сверхпроводники. Физические свойства кристаллов. Принцип симметрии Кюри, правило Неймана. Предельные группы симметрии. Взаимосвязь между симметрией кристаллов и их векторными свойствами на примере пирозлектричества. Взаимосвязь между симметрией кристаллов и их тензорными свойствами на примере теплового расширения

и магнитной восприимчивости. Особенности электронного строения диа-, пара-, ферро- и антиферромагнитных кристаллов. Сегнетоэлектрики. Пьезоэлектрики. Особенности взаимосвязи строения, магнитных и электрофизических свойств перовскитов (на примере BaTiO_3 , LaMnO_3 , LaFeO_3 , CaMnO_3 , CaFeO_3 и SrFeO_3) – эффекты кооперативного Ян-Теллеровского искажения, зарядового диспропорционирования, орбитального и спинового упорядочения.