

Министерство образования и науки РФ
Алтайский государственный университет

С.А. Безносюк, М.С. Жуковский, Ю.В. Терентьева

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Учебное пособие



Барнаул

Издательство
Алтайского государственного
университета
2013

УДК 51:54(075.8)

ББК 24в641я73

Б 399

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, профессор **В.В. Поляков** (АлтГУ),
доктор физ.-мат. наук, профессор **В.А. Плотников** (АлтГУ)

Б 399 Безносюк, С.А.

Математическая химия наноструктурных материалов
[Текст] : учебное пособие / С.А. Безносюк, М.С. Жуковский,
Ю.В. Терентьева. – Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2013. – 123 с.
ISBN 978-5-7904-1488-6

Рассмотрены основные разделы математической химии: алгебра, топология и информатика. Алгебра представлена теорией векторов и матриц и теорией групп, топология – теорией множеств и графов и атомной топологией Бейдера, информатика – теорией информации. Все эти методы математической химии важны для описания, дизайна и инжиниринга наносистем в материалах.

Пособие предназначено для студентов, магистрантов, аспирантов и преподавателей физических и химических факультетов университетов.

УДК 51:54(075.8)

ББК 24в641я73

*Издание опубликовано в рамках реализации
Программы стратегического развития
Алтайского государственного университета*

ISBN 978-5-7904-1488-6

© Безносюк С.А., Жуковский М.С.,
Терентьева Ю.В., 2013

© Оформление. Издательство
Алтайского государственного
университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
Глава 1. Алгебра матриц и векторов в химии. Теория групп и ее химическое приложение.	7
1.1. Векторы и матрицы	7
1.1.1. Векторы. Основные понятия	8
1.1.2. Линейные операции над векторами	10
1.1.3. Произведения векторов	12
1.1.4. Запись вектора в виде столбца и строки	15
1.1.5. Матрицы	18
1.1.6. Арифметические операции над матрицами.....	19
1.1.7. Обратные векторы.....	24
1.1.8. Обратные матрицы.....	25
1.1.9. Ассоциированные матрицы.....	27
1.1.10. Унитарные преобразования.....	27
1.1.11. Преобразование базиса	28
1.1.12. Собственные векторы и собственные значения линейного преобразования.	29
1.2. Симметрия и группы симметрии.	31
1.2.1. Значение симметрии	31
1.2.2. Множества и элементы	32
1.2.3. Теория групп. Понятие группы.....	33
1.2.4. Операции симметрии, применяемые к молекуле.....	34
1.2.5. Таблицы произведений элементов групп	37
1.2.6. Генераторы и подгруппы. Произведения групп.	40
1.2.7. Смежные классы.....	42
1.2.8. Сопряженные элементы и классы	43
1.2.9. Отображения	45
1.2.10. Представления	46

Глава 2. Топология и ее применение в химии	49
2.1. Множества	49
2.1.1. Основные понятия теории множеств	49
2.2. Графы	56
2.2.1. Типы графов	56
2.2.2. Маршруты, связность и степени графа	59
2.2.3. Деревья	60
2.3. Графы и структура молекул	61
2.3.1. Способы описания структуры молекул. Геометрические модели ..	61
2.3.2. Графы в классической теории химического строения	63
2.3.3. Молекулярные графы и типы молекулярных структур	65
2.3.4. Стереохимическая топология	69
2.4. Атомы и топология электронной плотности (по Р. Бейдеру)	72
2.4.1. Роль электронной плотности	73
2.4.2. Топологические свойства электронной плотности	75
2.4.3. Критические точки и их классификация	77
2.4.4. Критические точки молекулярного распределения заряда	82
2.4.5. Векторное поле градиента электронной плотности	85
2.4.6. Фазовые портреты векторного поля градиента	86
2.4.7. Элементы молекулярной структуры	88
2.4.8. Химические связи и молекулярные графы	92
2.4.9. Циклы и клетки	94
2.4.10. Молекулярная структура и ее изменение.	94
Глава 3. Информация и энтропия	102
3.1. Понятие информации	103
3.2. Количественная оценка информации	104
3.3. Функциональная организация мультиструктур наноматериалов	106
3.3.1. Самоорганизация термостатистических макросистем наночастиц	106
3.3.2. Квантовая модель термостатистических макросистем наночастиц	107
3.3.3. Функциональные процессы самоорганизации наночастиц.	110
Заключение	116
Библиографический список	121

Учебное издание

*Сергей Александрович Безносюк,
Марк Сергеевич Жуковский,
Юлия Владимировна Терентьева*

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Учебное пособие

Редактирование и подготовка
оригинал-макета: Е.М. Федяева

ЛР 020261 от 14.01.1997 г.

Подписано в печать 25.11.2013. Формат 60x84(1/16)

Бумага офсетная. Усл. печ. л. 7,2.

Тираж 300 экз. Заказ 370.

Издательство Алтайского государственного университета

Типография Алтайского государственного университета:
656049, Барнаул, ул. Димитрова, 66