

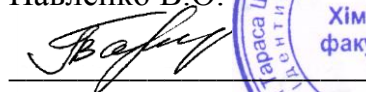
**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“08” травня 2019 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МАГНЕТОХІМІЯ

для студентів

галузі знань **10 Природничі науки**

спеціальність **102 Хімія**

освітній рівень **“бакалавр”**

освітня програма **Хімія**

вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**

Навчальний рік **2019/2020**

Семестр **V**

(V семестр програми підготовки за ОР «бакалавр»)

Кількість кредитів ECTS **3 кредити**

Мова викладання, навчання та оцінювання

українська

Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Яцимирський Андрій Віталійович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «____» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «____» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробник:

**Яцимирський Андрій Віталійович, доц., к.х.н., доц.
, доц., к.х.н., доц.**



ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії

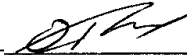


(Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від “09” квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “08” травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____  _____ (____ Ройк О.С.____)

Протокол № від “__” _____ 20__ року

Голова науково-методичної комісії _____ (____)

1. **Мета дисципліни** – навчити студентів сучасним поглядам на природу взаємодії речовин з магнітним полем і на магнітні властивості речовин, використовувати у дослідженнях методи вимірювання статичної магнітної сприйнятливості і намагніченості речовин.

2. **Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни**
Знати основи фізики та хімії, а також володіти необхідним математичним апаратом, включаючи інтегрування та диференціювання.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс складається з лекційних занять за темами, пов'язаними із природою електромагнітного випромінювання та магнітного поля, електронною будовою атомів та іонів хімічних елементів, основними типами магнітної поведінки речовин, основними типами магнітних матеріалів. Подати основні підходи до моделювання твердого тіла статистичними методами та методами квантової механіки.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчити студентів правильно підбирати методи для дослідження стану поверхні каталізаторів різних процесів; отримувати в повному обсязі інформацію з того чи іншого метода дослідження, вміти її аналізувати і обробляти

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форма (та/або методи і технології) викладання і навчання)	Методи оцінювання* та порогів критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати класифікацію частинок на бозони та ферміони. Вигляд розподілів Больцмана та Фермі-Дірака. Межі застосування розподілів.	Лекції, лабораторні заняття	<i>МКР, ІР, ПсК</i>	15
1.2	Модель вільного електрону в ящику та в твердому тілі. Визначення енергії Фермі. Поняття енергетичних зон та класифікацію твердих тіл за типом провідності на її основі.	Лекції, лабораторні заняття	<i>МКР, ІР, ПсК</i>	15
1.3	Діамагнітні, парамагнітні та ферромагнітні властивості твердого тіла. Закони Кюрі та Кюрі-Вейса.	Лекції, лабораторні заняття	<i>МКР, ІР, ПсК</i>	10
2. Вміння				
2.1	Розрахувати термодинамічні властивості на основі розподілу Больцмана.	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	15

2.2	Вміти обрахувати енергію Фермі для металу.	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	5
2.3	Розрізнати тип провідності за шириною і типом енергетичних зон	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	5
2.4	Вміти побудувати першу зону Брилюена для простих випадків.	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	10
2.5	Визначати тип твердого тіла за магнітною сприйнятливістю: її величиною та її залежності від напруженості магнітного поля	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	10
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації	Лекції, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	2
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються квантово-хімічних моделей твердого тіла та його магнітних властивостей	Лекції, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	0
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та академічної доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації	Лекції, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	8

**Модульні контрольні роботи (МКР)*

Індивідуальна робота (ІР): Усні відповіді на практичних заняттях, доповнення, співбесіди за МК.

ПсК - підсумковий контроль

Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.	+	+	+	+	+	+	+	+					
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.	+	+	+										
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Готувати розчини та реагенти, планувати та здійснювати хімічні експерименти.													
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+					
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.										+	+		
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.													
Комунікація													
Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	+	+	+							+			
Вміння коректно використовувати мовні засоби в професійній діяльності залежно від мети спілкування.											+		
Вміння відображати результати своїх наукових досліджень у письмовому вигляді.	+	+	+	+	+	+	+	+					

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. усна доповідь під час практичного заняття;
- 1.2. активність під час лабораторного заняття та оформлення результатів лабораторного експерименту;
- 1.3. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.4. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

7.2. Організація оцінювання:

5 семестр

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2	
	Min. – 15 балів	Max. – 25 балів	Min. – 21 балів	Max. – 35 балів
Усна відповідь	3	5	3	5
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	5
Модульна контрольна робота 1	9	15		
Модульна контрольна робота 2			15	25

5 семестр

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Іспит	Разом
Max. Балів	25	35	40	100
Min. балів*	15	21	24	60

* рекомендований мінімум

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Магнетохімія та моделі квантової механіки" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання групових тематичних контрольних робіт, виконання лабораторних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (критично розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59
Зараховано/ Passed	60-100
Не зараховано/ Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	Лаб.роб.	С/Р
<i>Квантовомеханічне моделювання твердого тіла</i>				
	ТЕМА 1. <u>Статистичний опис ідеального газу з частинок, що описуються квантовою механікою. (Квантова статистика ідеального газу)</u>			
	Лекція 1. Ідеальний газ з частинок, що описуються квантовою механікою. Класифікація частинок: Ферміони та Бозони. Число можливих енергетичних станів. Загальне число станів. Термодинамічна імовірність для ферміонів, бозонів та квазікласичних частинок. Термодинамічні співвідношення для виводу розподілів Больцмана, Фермі-Дірака та Бозе-Енштейна.	2		5
	Лекція 2. Вивід розподілу Больцмана. Вивід розподілу Фермі-Дірака. Межі застосування класичної (квазікласичної) статистики (статистичної термодинаміки). Поняття фазового простору. Фазовий простір ідеального газу.	2	8	5
	ТЕМА 2. <u>Модель вільних електронів в металі або модель електронного газу в металі</u>			
	Лекція 3. Основні рівняння квантової механіки. Модель “вільного електрону в ящику”: 1 вимір та 3 виміри. Умова нормування.	1		4
	Лекція 4. Модель вільних електронів в металі або модель електронного газу в металі — постановка задачі. Вивід формули для кількості енергетичних станів (енергетичної густини розподілу станів) для електронів в металі. Графіки залежності розподілу Фермі-Дірака та кількості енергетичних станів при 0 K та при $T > 0$ від енергії. Визначення енергії Фермі.	2		4
	Лекція 5. Енергетична густина розподілу станів електронів в твердому тілі. Метали, ізолятори та напівпровідники. Поняття енергетичної зони та зонної моделі.	1		3
	Лекція 6. Статистична термодинаміка електронного газу в металі (Статистика електронного газу в металі). Обрахунок енергії Фермі для міді. Уточнення графіків залежності розподілу Фермі-Дірака та кількості енергетичних станів при $T > 0$ від енергії.	2		4
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	2		

	ТЕМА 3. Квантовомеханічний опис твердого тіла (метала). Зонна теорія.			
	Лекція 7. Дельта-функція Дірака (довідково). Власні значення оператора на прикладі імпульсу. Власні значення оператора імпульсу для а) відсутність граничних умов; б) в нормованому об'ємі; в) з періодичними умовами.	2		4
	Лекція 8. Нескінчений кристал. Електрон в періодичному полі. Рівняння Шредінгера для кристала. Обернений простір — довідка. Зона Брилюена.	2		4
	Лекція 9. Сильний зв'язок електрона з атомом в кристалі і пояснення виникнення енергетичної зони. Слабкий зв'язок електрона з атомом в кристалі (майже вільні електрони) і пояснення виникнення енергетичної зони. Графічне зображення енергетичних зон в залежності від хвильового вектора.	2		4
	Лекція10. Атомні одиниці довжини та енергії. Енергія Фермі та середнє значення кінетичної енергії електронного газу в атомних одиницях енергії. Введення в теорію функціонала густини. Теорія Томаса-Фермі-Дірака.	2		4
	ТЕМА 4. Основні типи магнітної поведінки речовин			
	Лекція11. Основні рівняння електродинаміки і магнетизму. Типи магнітних явищ.	2	2	4
	Лекція12. Діамагнетизм. Розрахунок діамагнітної сприйнятливості.	2	2	4
	Лекція13. Парамагнетизм. Закони Кюрі ті Кюрі-Вейса. Температурно-незалежний парамагнетизм.	2	2	4
	Лекція14. Феромагнетизм. Основні характеристики феромагнетиків. Антиферомагнетизм і ферімагнетизм	2		2
	<i>Модульна контрольна робота 2</i>	2		
	ВСЬОГО	30	14	55

Загальний обсяг **90 год.**, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Лабораторні - **14**

Практичні – **1 год.**

Самостійна робота – **55 год.**

Основна: (Базова)

- Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической хими. – М.: “Высш.школа”, 1973.-479 с.
- Забуга В.Я. Статистична термодинаміка ідеальних газів : Навчальний посібник для студ. хім-го фа-ту / В.Я. Забуга; КУ ім.Т.Шевченка. – Київ : Київський університет, 1999. – 51с. – ISBN 966-594-094-5
- Давыдов А.С. Квантовая механика.- Москва: Гос.издат. физ-мат литературы.-1963.-748 с.
- Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009.-479 с.
- Яцимирський В.К. Фізична хімія : підручник для вищих навчальних закладів / Віталій Яцимирський. – Київ ; Ірпінь : Перун, 2010. – 511, [1] с. : іл., табл. – Додатки: с. 509-511. – Бібліогр.: с. 5. – ISBN 978-966-569-224-9.
- Слетер Дж. Электронная структура молекул. М. : Мир, 1965.
- Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М. : Наука, 1978.
- В.О. Павленко, І.О. Фрицький. Вступ до магнетохімії. – Київ, ВПЦ «Київський університет», 2012.
- Р. Карлин. Магнетохимия. - М.:Мир, 1989.
- Ю.В. Ракитин, В.Т. Калинин. Современная магнетохимия. - СПб.: Наука, 1994.
- Р. Драго. Физические методы в химии: В 2 т. – М.: Мир, 1981.
- О. Kahn. Molecular Magnetism. - New York: VCH, 1994.
- A.F. Orchard. Magnetochemistry. – Oxford Chemistry Primers, 2003. – 180 pp.

Додаткова:

- Левич В.Г. Введение в статистическую физику : Учеб. пособие / В.Г. Левич. – 2-е изд., перераб. – Москва : ГИТТЛ, 1954. – 528 с.
- Усенко Н.І. Статистична термодинаміка ідеального газу : теорія і задачі: навчальний посібник для студентів хімічного факультету / Н. І. Усенко, О.С. Роїк; КНУТШ. – Київ : Київський університет, 2007. – 51с. – ISBN 978-966-581-861-8.
- Федорченко А.М. Теоретична фізика : підручник / А.М. Федорченко. – Київ : Вища школа. – ISBN 5-11003761-2. Т. 2 : Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. – 1993. – 415 с.
- Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Высшая школа,1963.- 622 с.
- Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков. Учеб.пособие.- М.: Высшая школа,1980.- 215 с.
- Л. Вульфсон. Молекулярний магнетизм. - М. Химия, 1992.
- Р. Драго. Физические методы в неорганической химии. - М.: Мир, 1967.
- В.Т. Калинин, В.Т.Ракитин. Введение в магнетохимию. - М.:Наука, 1980.
- П. Селвуд. Магнетохимия. М.: ИЛ. 1958.

В тому числі й інтернет ресурси