

**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**

**ТЕОРІЯ ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ**

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.  
: Яцимирський Андрій Віталійович, 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 \_\_\_\_\_  \_\_\_\_\_ ( \_\_\_\_\_ Роїк О.С. \_\_\_\_\_ )

Протокол № від “\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ ( \_\_\_\_\_ )

1. **Мета дисципліни** – полягає в розборі виникнення хімічного зв'язку в різних сполуках за допомогою методів квантової механіки.

## 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 з утворенням та інтерпретацією хімічного зв'язку для дво- і багатоатомних молекул. Показано застосування теорії симетрії з елементами теорії груп для інтерпретації хімічного зв'язку в багатоатомних молекулах, а також в кристалах. Викладені базові підходи до моделювання хімічного зв'язку в твердому тілі методами квантової механіки та його опису та опису електропровідності твердих тіл методами статистичної фізики.

## 4. Завдання (навчальні цілі):

Надання студентам знань за основними напрямками квантової хімії та її застосування для квантово-хімічного опису різних систем: модельні системи, одно- і багато електронні атоми, прості та складні молекули, кристали.

## 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
<b>1. Знання</b>				
1.1		Лекції, лабораторні заняття	<i>МКР, ІР, ПсК</i>	<b>15</b>
1.2	Знати класифікацію частинок на бозони та ферміони. Вигляд розподілів Больцмана та Фермі-Дірака. Межі застосування розподілів.	Лекції, лабораторні заняття	<i>МКР, ІР, ПсК</i>	<b>15</b>
1.3	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>	<b>10</b>
<b>2. Вміння</b>				
2.1	Пояснити направленість хімічного зв'язку та інтерпретувати його походження.	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>15</b>
2.2	Користуватися методом молекулярних орбіталей	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>5</b>

2.3	Розрахувати термодинамічні властивості на основі розподілу Больцмана.	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>5</b>
2.4	Вміти обрахувати енергію Фермі для металу.	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>10</b>
2.5	Розрізнити тип провідності за шириною і типом енергетичних зон. Вміти побудувати першу зону Брилюена для простих випадків	Лекції, лабораторні заняття, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>10</b>
<b>3. Комунікація</b>				
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>	<b>5</b>
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>2</b>
<b>4. Автономність та відповідальність</b>				
4.1	Вміти проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються квантово-хімічних моделей молекул та твердого тіла та його властивостей	Лекції, самостійна робота	<i>МКР, ІР</i>	<b>0</b>
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>	<b>8</b>

*\*Модульні контрольні роботи (МКР)*

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

*ПсК - підсумковий контроль*

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	3.1	3.2	4.1	4.2
<b>Знання</b>												
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань	+	+	+	+	+	+	+	+				
Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії	+	+	+	+	+	+	+	+				
Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді	+	+	+									
Знання основних типів хімічних реакцій та стереохімічних досліджень				+	+	+	+	+				
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин	+	+	+	+	+	+	+	+			+	
Знання та розуміння періодичного закону та періодичної системи елементів, здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основ	+	+	+	+	+	+	+	+				
Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку	+	+	+	+	+	+	+	+				
Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів	+	+	+				+					+
Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів							+	+				+
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування для рішення практичних задач	+	+	+	+	+	+		+				

<b>Вміння</b>												
Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї	+	+	+									
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
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.									+	+		



## 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

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

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ**

№ п/п	Назва	Кількість годин		
		лекції	конс.	С/Р
	<i><b>Змістовий модуль 1</b></i>			
	<b>Тема 1. Двохатомні молекули.</b>			
	Задача про молекулярний іон водню. Молекулярні орбіталі (МО) та метод МО-ЛКАО. Задача про молекулу водню.	5		6
	Ковалентний зв'язок. Метод валентних зв'язків (ВЗ).	3		4
	Порівняння методів МО та ВЗ, їхнє удосконалення.	2		2
	<b>Тема 2. Багатоатомні молекули.</b>			
	Багатоатомні молекули з локалізованими зв'язками. Валентність. Донорно-акцепторний зв'язок. Гібридні орбіталі.	2		2
	Просторова будова молекул. Теорія симетрії. Молекули з делокалізованими зв'язками.	2		2
	Координаційні сполуки перехідних металів. теорії кристалічного поля. Теорія поля лігандів.	4		4
	<b>Тема 3. Правила симетрії в хімічних реакціях.</b>			
	Симетрія молекули, перехідного стану та продуктів. Граничні орбіталі. Правила Вудворта-Хофмана.	3		3
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	2		
	<b>Разом</b>	23		23
	<i><b>Змістовий модуль 2</b></i>			
	<b>Тема 4. Хімічний зв'язок конденсованого стану.</b>			
	Класифікація твердих тіл за типом зв'язку. Іонний зв'язок. Міжмолекулярні зв'язки. Водневий зв'язок. Будова і властивості речовин у конденсованих фазах. - Ковалентний зв'язок. Металічний зв'язок.	2		2
	<b>Тема 5. Зонна теорія твердого тіла (метала).</b>			
	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		2
	Основні рівняння квантової механіки. Модель "вільного електрону в ящику": 1 вимір та 3 виміри. Умова нормування.	1		1
	Нескінчений кристал. Електрон в періодичному полі. Рівняння Шредінгера для кристала. Обернений простір —	2		3

довідка. Зона Брилюена.			
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		2
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		2
<b>Тема 6. Статистичний опис ідеального газу з частинок, що описуються квантовою механікою. (Квантова статистика ідеального газу)</b>			
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		2
Вивід розподілу Больцмана. Вивід розподілу Фермі-Дірака. Межі застосування класичної (квазікласичної) статистики (статистичної термодинаміки). Поняття фазового простору. Фазовий простір ідеального газу.	2		3
Тема 7. Модель вільних електронів в металі або модель електронного газу в металі			
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		2
Енергетична густина розподілу станів електронів в твердому тілі. Метали, ізолятори та напівпровідники. Поняття енергетичної зони та зонної моделі.		1	1
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		2
<i>Модульна контрольна робота 2</i>	2		
<b>Разом</b>	22		22
<b>ВСЬОГО</b>	<b>44</b>	<b>1</b>	<b>45</b>

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

Лекцій – **44 год.**

Консультації – **1 год**

Практичні – **0 год.**

Самостійна робота – **45 год.**

**Основна:** (Базова)

Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009.-479 с.

Давыдов А.С. Квантовая механика.- Москва: Гос.издат. физ-мат литературы.-1963.-748 с.

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

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.

**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.

Р. Драго. Физические методы в неорганической химии. - М.: Мир, 1967.

***В тому числі й інтернет ресурси***