

Міністерство освіти і науки України
Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»
Фізико-технічний факультет
Кафедра матеріалознавства і новітніх технологій

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор _____

“ ____ ” _____ 2022 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Теорія хімічного зв’язку

Освітня програма	Прикладна фізика та наноматеріали
Спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
Галузь знань	10 Природничі науки

Івано-Франківськ
2022

Робоча програма спецкурсу «Теорія хімічного зв'язку»
для підготовки здобувачів третього рівня вищої освіти – доктора філософії
спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали. „___” _____, 2022 р.
– ___ с.

Розробники: (вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)
Яремій Іван Петрович, професор кафедри матеріалознавства і новітніх
технологій, доктор фізико-математичних наук, професор.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри матеріалознавства і новітніх
технологій

Протокол № 1 від “29” серпня 2022 р.

Завідувач кафедри матеріалознавства і новітніх технологій

“29” серпня 2022 р. _____ Богдан ОСТАФІЙЧУК

Схвалено методичною комісією фізико-технічного факультету.

Протокол від “30” серпня 2022 р. № 1

“30” серпня 2022 р.

Голова _____
(підпис)

Михайло ЯЦУРА
(прізвище та ініціали)

© Прикарпатський національний
університет імені Василя Стефаника,
2022 рік

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 3	Галузь знань 10 Природничі науки	За вибором	
Модулів – 1	Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали	Рік підготовки:	
Змістових модулів – 2		2021-й	-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання _____ (назва)		Семестр	
Загальна кількість годин –90		3-й	-й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	третій освітньо-науковий рівень – доктор філософії	Лекції	
		20 год.	год.
		Практичні, семінарські	
		10 год.	год.
		Лабораторні	
		__ год.	__ год.
		Самостійна робота	
		60 год.	год.
Індивідуальні завдання:			
__ год.			
Вид контролю:			
__ залік __			

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить: $40/80=0,5$

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета дисципліни полягає у забезпеченні аспірантів сучасними знаннями про природу хімічного зв'язку, методи розрахунку просторової та електронної структури молекул (в газовій фазі і розчинах), а також електронної будови твердих тіл, набуття навичок аналізу результатів розрахунків електронної структури молекул і твердих тіл; передбачається формування у аспірантів знань про основних підходи теоретичного опису хімічного зв'язку в з акцентом на аналіз результатів експериментальних рентгеноспектральних методів вивчення електронної структури конденсованих структурних одиниць середовищ.

Предметом вивчення навчальної дисципліни є: квантова теорія хімічного зв'язку в молекулах та рентгеноспектральні методи аналізу їх електронної структури.

Завдання дисципліни – набуття аспірантами розуміння квантово-механічної природи хімічного зв'язку та навичок аналізу електронної структури простих хімічних сполук.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен:

Знати:

- основні методи теорії валентності; переваги та недоліки цих методів при їх застосуванні до опису хімічного зв'язку в складних молекулах;
- теоретичні основи та практичну реалізацію методів фотоелектронної, рентгеноелектронної та рентгенівської спектроскопії;
- основи геометричного і алгебраїчного підходів до теорії симетрії для молекул і твердих тіл;
- основи сучасних методів опису хімічного зв'язку;
- уявлення про особливості різних типів хімічного зв'язку в газовій фазі і конденсованому стані.

Вміти:

- використовувати отримані знання для опису електронної структури молекул на основі аналізу рентгенівських та фотоелектронних спектрів;
- аналізувати дані розрахунків параметрів хімічного зв'язку речовин в різних агрегатних станах;
- орієнтуватися в фаховій літературі, в рамках проблематики опису різних типів хімічного зв'язку.

Володіти:

- описом симетрії молекул і твердих тіл з точки зору квантової хімії;
- розрахунком параметрів хімічного зв'язку речовин в різних агрегатних станах.

3. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Квантова теорія хімічного зв'язку

Вступ. Ранні теорії хімічного зв'язку. Основи квантової механіки. Основні постулати квантової механіки. Оператори. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера. Варіаційний метод Рітца. Теорія збурень.

Одноелектронні атоми. Розв'язок рівняння Шредінгера для атома водню. Розв'язок θ -рівняння. Розв'язок R-рівняння. Атомні орбіталі. Багатоелектронні атоми. Метод самоузгодженого поля Хартрі. Принцип Паулі і визначник Слетера. Двоелектронна система. Наближення аналітичних функцій атомних орбіталей. Принцип побудови періодичної системи елементів.

Молекули. Наближення Борна-Опенгеймера. Метод валентних зв'язків. Розрахунок молекули водню методом валентних зв'язків. Наближення лінійної комбінації атомних орбіталей. Метод молекулярних орбіталей (МО). Загальні положення методу МО. Аналогія із теорією багато електронних атомів. Наближення лінійної комбінації атомних орбіталей. Рівняння Рутаана. Вибір базисних функцій. Розрахунок молекули водню по методу МОЛКАО. Основний стан молекули водню. Хвильова функція і енергія стану H_2 .

Молекулярні орбіталі двохатомних молекул. МО гомоядерних двохатомних молекул. МО двохатомних гетеро ядерних двохатомних молекул. Теорема віріала і природа хімічного зв'язку. Насиченість ковалентного зв'язку. Донорно-ацепторний зв'язок. Іонний зв'язок.

Теорія кристалічного поля. Розщеплення d-орбіталей в полі лігандів. Комплекси сильного і слабого кристалічних полів. Застосування теорії МО для опису електронної будови координаційних сполук.

Змістовий модуль 2. Вивчення електронної структури молекул методами рентгенівської спектроскопії.

Експериментальні та теоретичні основи методів рентгенівської спектроскопії. Фізичні основи методів емісійної та абсорбційної спектроскопії. Основи методу рентгеноелектронної спектроскопії. Енергетична структура рентгенівських спектрів емісії та поглинання та її зв'язок із електронною структурою молекул. Енергія рентгенівських емісійних і абсорбційних переходів в наближені заморожених орбіталей. Вплив спотворення орбіталей при утворенні дірок. Використання віртуальних орбіталей для інтерпретації рентгенівських спектрів поглинання

Інтенсивність та форма емісійних та абсорбційних ліній. Імовірність рентгенівських переходів та форма ліній рентгенівських спектрів в молекулах.

Інтенсивність рентгенівських переходів в молекулі. Визначення електронної густини на атомах в молекулі рентгеноспектральним методом.

Енергія рентгеноспектрального переходу та її залежність від характеру розподілу електронної густини на атомі. Ефективний заряд атома і розподіл електронної густини в молекулі. Загальний аналіз енергетичного зсуву K-рівня та $K\alpha_{1,2}$ -лінії.

Визначення ефективних зарядів атомів в молекулах на основі використаних хімічних зсувів енергії рентгеноспектральних переходів. Розрахунок залежності $K\alpha_{1,2}$ -ліній від заряду вільного іона. Визначення зарядів в об'ємах на основі методу ефективного іона.

Рентгеноспектральне вивчення структури простих молекул. Електронна структура HCl і H₂S та її рентгенівські спектри. Приклади інтерпретації. Рентгеноспектральне вивчення електронної структури двохатомних молекул HCl і Cl₂. Рентгенівські спектри і електронна структура трьохатомних кутових молекул CS₂, SCO, CO₂. Рентгенівські спектри іонів і молекул елементів третього періоду з вакантними 3d-орбіталями.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	денна форма					
	усього	у тому числі				
лек.		пр. (сем.)	лаб.	інд.	с.р.	
1	2	3	4	5	6	7
Змістовий модуль 1. Квантова теорія хімічного зв'язку						
Тема 1 Вступ. Ранні теорії хімічного зв'язку.		2	1	–	–	6
Тема 2. Одноелектронні та багатоелектронні атоми.		2	1			6
Тема 3. Молекули. Наближення Борна-Опенгеймера		2	1			6
Тема 4. Молекулярні орбіталі двохатомних молекул.		2	1			6
Тема 5. Теорія кристалічного поля.		2	1			6
Змістовий модуль 2. Вивчення електронної структури молекул методами рентгенівської спектроскопії						
Тема 6. Експериментальні та теоретичні основи методів рентгенівської спектроскопії.		2	1	–	–	6
Тема 7. Інтенсивність та форма емісійних та абсорбційних ліній.		2	1			6

Тема 8. Енергія рентгеноспектрального переходу та її залежність від характеру розподілу електронної густини на атомі.		2	1			6
Тема 9. Визначення ефективних зарядів атомів в молекулах		2	1			6
Тема 10. Рентгеноспектральне вивчення структури простих молекул.		2	1			6
Усього годин	90	20	10	–	–	60

5. Теми семінарських занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
Змістовий модуль 1. Квантова теорія хімічного зв'язку		
1	Форма атомних орбіталей. Полярний зв'язок. Електричний дипольний момент молекул. Делокалізовані і локалізовані молекулярні орбіталі. Молекула H ₂ O.	2
2	Опис молекули метана. Гібридизація орбіталей. Електронна конфігурація і властивості молекул етана, етилена і ацетилену	2
3	Комплекси перехідних металів. Міжмолекулярна взаємодія.	2
Змістовий модуль 2. Вивчення електронної структури молекул методами рентгенівської спектроскопії		
4	Приклади інтерпретації фотоелектронних спектрів. Відносна інтенсивність рентгеноелектронних спектрів. Інтерпретація рентгенівських емісійних спектрів.	2
5	Електронні спектри і будова простих молекул. Рентгенівські спектри і будова оксидів.	2
	Усього годин	10

6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Міжмолекулярний рух і електромагнітний спектр.	6
2	Молекулярні спектри випромінювання і поглинання і комбінаційного розсіяння.	6
3	Теорія молекулярних спектрів	6

4	Коливально-обертовий спектр двохатомних молекул. Наближення гармонічного осцилятора.	6
5	Визначення молекулярних параметрів двохатомних молекул із інфрачервоних коливально-обертових спектрів.	6
6	Коливні спектри і будова багатоатомних молекул.	6
7	Контроль складу поверхні досліджуваного зразка у фотоелектронній спектроскопії	6
8	Рентгеноелектронний кількісний аналіз.	6
9	Будова рентгенівських спектрометрів.	6
10	Рентгенівські спектри іонів і молекул елементів третього періоду з вакантними 3d-орбіталями.	6
	Усього годин	60

7. Методи контролю

- Перевірка засвоєння теоретичного матеріалу, в т. ч методом тестування.
- Перевірка якості виконання практичних робіт.

8. Розподіл балів, які отримують аспіранти

Поточне тестування, семінарські заняття та самостійна робота				
Змістовий модуль №1				
T1	T2	T3	T4	T5
10	10	10	10	10

Поточне тестування, семінарські заняття та самостійна робота				
Змістовий модуль №2				
T6	T7	T8	T9	T10
10	10	10	10	10

T1, T2 ... – теми змістових модулів.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
80 – 89	B	добре	
70 – 79	C		
60 – 69	D	задовільно	
50 – 59	E		

26 – 49	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

9. Методичне забезпечення

- 1) Лекції, завдання для практичних робіт.
- 2) Програмне забезпечення: навчально-контролюючі програми з кожної теми курсу.

10. Рекомендована література

Базова

1. К.Б. Яцимирский, В.К.Яцимирский Химическая связь. – К.: «Вища школа», 1975
2. В.И. Минин, Б.Я. Симкин, Р.Н. Миняев, Теория строения молекул. – М.: «Высшая школа», 1979.
3. В.А.Губанов, Э.З.Курмаев и др. Квантовая химия твердого тела. – М.: «Наука», 1984
4. К.С. Краснов, Молекулы и химическая связь. – М., 1977.
5. Л.Н. Мазалов, Рентгеновские спектры и химическая связь. – М.: «Наука», 1982.
6. Блохин М.А. Физика рентгеновских лучей. – К.: Гостехиздат, 1957.
7. Блохин М.А. Методы рентгеноспектральных исследований. – М.: Физматгиз, 1956.
8. Мазалов Л.Н. Рентгеновская и рентгеноэлектронная спектроскопия молекул. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 1979.
9. Зигбан К., Нордлинг К., Фальман А. И др. Электронная спектроскопия. – М.: Мир, 1971.
10. Нефедов В.И., Вовна В.И. Электронная структура химических соединений. – М.: „Наука”, 1987.