

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

Фізико-технічний факультет

Кафедра матеріалознавства і новітніх технологій

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Теорія хімічного зв'язку

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

Затверджено на засіданні кафедри

Протокол № 1 від 28 серпня 2023 р.

м. Івано-Франківськ – 2023

1. Загальна інформація	
Назва дисципліни	Теорія хімічного зв'язку
Викладач	Яремій Іван Петрович
Контактний телефон викладача	
E-mail викладача	yaremiyir@pnu.edu.ua
Формат дисципліни	Очний
Обсяг дисципліни	Кредити ЄКТС –3 (90 год.)
Посилання на сайт дистанційного навчання	https://d-learn.pnu.edu.ua/
Консультації	Щотижня
2. Анотація до курсу	
<p>Курс покликаний дати аспірантам знання 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. В курсі 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.</p> <p>Курс складається із 2 розділів та циклу семінарських занять.</p> <p>Результати оцінювання навчальних досягнень кожного студента за виконані завдання заносяться до електронного журналу.</p>	
3. Мета та завдання курсу	
<p>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.</p> <p>Завдання дисципліни – набуття аспірантами розуміння квантово-механічної природи хімічного зв'язку та навичок аналізу електронної структури простих хімічних сполук.</p>	
4. Компетентності	
Інтегральна компетентність.	
Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та / або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних і створення нових цілісних знань та/або професійної практики.	
Загальні компетентності	
<p>ЗК.1. Розуміння концептуальних та методологічних засад у галузі науково-дослідної та/або професійної діяльності.</p> <p>ЗК.2. Здатність розв'язувати значущі наукові проблеми, переосмислення наявне та створювати нове цілісне знання та/або професійну практику.</p> <p>ЗК.3. Здатність застосовувати у науковій та/або практичній діяльності сучасні знання з галузей, використовувати новітні інформаційні та комунікаційні технології.</p>	

ЗК. 6. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології, навички етичної поведінки у цифровому та іншомовному інформаційно-комунікативному просторі.

ЗК.11. Здатність використовувати сучасні методи і технології наукової комунікації українською та іноземними мовами.

ЗК.12. Комунікативні навички. Здатність ефективно спілкуватися із спеціальною та загальною аудиторіями, а також представляти складну інформацію у зручний та зрозумілий спосіб усно та письмово, використовуючи відповідну технічну лексику та методи.

Фахові компетентності

ФК.1. Здатність реалізувати самостійну науково-дослідницьку та науково-педагогічну діяльність у галузі прикладної фізики та нанотехнологій з використанням новітніх наукових знань.

ФК.2. Здатність формулювати основні атрибути прикладної фізичної задачі, будувати її модель, визначати завдання фізичного дослідження.

ФК.3. Здатність аналізувати і узагальнювати результати сучасних досліджень у галузі, адаптувати їх для вирішення наукових і прикладних проблем у галузі прикладної фізики.

ФК. 4. Здатність здійснювати теоретичні та експериментальні наукові дослідження, застосувати їх методи, трактувати отримані результати, виявляти властивості та характеристики об'єктів дослідження у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК. 5. Здатність створювати та аналізувати різні моделі фізичних систем, оцінювати адекватність їх щодо фізичних явищ і процесів, для пояснення для яких ці моделі створювалися.

ФК. 6. Здатність досліджувати складні системи через розв'язання багатофакторних задач, проводити систематичний аналіз, будувати інтерпретаційні зв'язки на основі синергетичного підходу, використовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделювання.

ФК. 7. Володіти сучасними експериментальними методами дослідження матеріалів, в тому числі наноструктурованих, методами опрацювання результатів експерименту за допомогою уніфікованих та специфічних програмних середовищ, сучасними способами представлення результатів дослідження.

ФК. 11. Викладацькі здатності. Компетентність правильно використовувати набуті знання і навички у викладацькій діяльності та при роботі у науково-дослідних лабораторіях.

5. Результати навчання

ПРН. 1. У результаті навчання здобувачі повинні набути знання і вміння, які дозволяють застосовувати сучасні концептуальні поняття у галузі фізики, прикладної фізики, суміжних галузей знань, зокрема, методології та принципів побудови наукових досліджень, для здійснення професійної діяльності.

ПРН. 2. Знання фундаментальних праць провідних вітчизняних і зарубіжних вчених у галузі прикладної фізики і суміжних наук.

ПРН. 3. Знання поглибленого рівня у сфері фізики, технології речових інтервалів, сучасних методів дослідження їх властивостей.

ПРН. 6 Прогнозувати результати виконання наукового проекту, новизну практичну цінність ініціювати та проводити комплексні дослідження у галузі, які проводять до отримання нових знань.

ПРН. 7. Використовувати інформаційно-комунікаційні технології у науковій та викладацькій діяльності, володіти навичками етичної поведінки в інформаційно-комунікаційному середовищі.

ПРН. 11. Оцінювати кращі європейські практики, сучасні цифрові ресурси та інструменти на предмет їх застосування для освітньо-наукових цілей.

ПРН. 12. Проводити математичне, аналітичне та комп'ютерне моделювання здійснювати статистичні обчислення або чисельні розрахунки, порівнювати їх результати із експериментами даними для більш повного опису досліджуваних систем.

ПРН.13. Вміти кваліфіковано відображати результати наукових, результатів у провідних вітчизняних і міжнародних наук виданих, виступити у підготовчих презентаціях, доповідачами наукових конференцій і симпозіумів. Вести дискусії з науковцями, представниками громадськості з наукових проблем відстоювати особистісну позицію.

ПРН. 14. Вільно презентувати та обговорювати з фахівцями і нефахівцями результати досліджень, наукові та прикладні проблеми правової сфери державною та іноземною мовами, кваліфіковано відображати результати досліджень у наукових публікаціях у провідних міжнародних наукових виданнях.

ПРН 15. Використовувати інформаційно-комунікаційні технології у науковій і викладацькій діяльності, володіти навичками етичної поведінки в інформаційно-комунікаційному середовищі.

ПРН. 16. Робити огляд та пошук інформації в спеціалізованій літературі, використовуючи різноманітні ресурси: журнали, бази даних, он-лайн ресурси.

ПРН. 17. Ясно та ефективно описувати інтенсивні, глибокі й деталізовані результати наукової роботи державною та іноземною мовами. Вести спеціалізовані наукові семінари та публікувати наукові статті в провідних наукових журналах.

ПРН. 18. Застосовувати загальнофілософські та загальнонаукові принципи та методи досліджень при виконанні власної дисертаційної роботи.

ПРН. 19. Здатність підготувати та успішно захистити дисертаційну роботу на основі індивідуальних досліджень, а також використати (та визнати) результати інших членів наукової групи.

ПРН. 21. Здатність правильно використовувати набуті знання і навички у викладацькій діяльності та при роботі у науково-дослідних лабораторіях.

6. Організація навчання курсу

Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
лекції	20
семінарські	10
самостійна робота	60

Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий
3	105 Прикладна фізика та наноматеріали	2	вибірковий

Тематика курсу

Тема	кількість год.		
	лекції	сем. заняття	сам. робота
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
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
7. Система оцінювання курсу			
Загальна система оцінювання курсу	Оцінювання здійснюється за національною на ECTS шкалою оцінювання на основі 100-бальної системи згідно «Положення про організацію освітнього процесу та розробку основних документів з організації освітнього процесу в Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника» (https://nmv.pnu.edu.ua/нормативні-документи/polozhenja/).		
	Участь в роботі впродовж семестру - 100 Поточний контроль включає: тестування, виконання всіх видів робіт, самостійна робота.		
Вимоги до письмової роботи			
Семінарські заняття	Оцінюються по п'ятибальній системі		
Умови допуску до підсумкового контролю	Виконані всі завдання		
8. Політика курсу			
Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються. У випадку таких подій – реагування відповідно до Кодексу честі Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.			
9. Рекомендована література			
Базова			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Рувінський М.А., Остафійчук Б.К., Галушак М.О., Фреїк Д.М., Яцура М.М. Курс загальної фізики. Квантова фізика атомів, молекул і конденсованих середовищ. Київ – Івано-Франківськ: «Плай», 1998. 520 с. 2. Возняк О.М., Прокопів В.В., Никируй Л.І. Використання середовища Maple для розв'язування задач квантової механіки. Навчальний посібник. Івано-Франківськ: Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, 2018. 156 с. 3. Frenking G., Sason S. Shaik. The chemical bond : chemical bonding across the periodic table. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, Weinheim, Germany, 2014 4. Daudel R. Quantum Theory of the Chemical Bond. Springer, Dordrecht, 1974. 5. Henry A. Bent. Molecules and the chemical bond. Trafford Pub., [Bloomington, IN], 2011. 			

Викладач:

Іван ЯРЕМІЙ