

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фізичної хімії**

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
навчальної роботи



[Signature] Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ФІЗИЧНА ХІМІЯ КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ**

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	8
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: професор Роїк Олександр Сергійович


Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.
на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

Розробник:

Роїк Олександр Сергійович, д.х.н., доцент, професор, кафедра фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від « 02 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 29 » червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« _____ » _____ 2022 року

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів з характером теплових коливань атомів, термодинамічними функціями твердих тіл, теорією вільних електронів Друде та теорією металів Зоммерфельда, застосуванням принципу Паулі та статистики Фермі-Дірака до електронів провідності в металах, парамагнітною сприйнятливістю електронів та основними положеннями зонної теорії.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

Студенти повинні знати основи фізики, математики, кристалохімії, квантової та фізичної хімії, вміти застосовувати знання фізичної та квантової хімії для аналізу та опису електронної структури та властивостей кристалічних тіл, володіти елементарними навичками диференціального та інтегрального числення.

3. Анотація навчальної дисципліни: навчальна дисципліна розглядає теоретичний базис, який є необхідним для розуміння фізичних принципів формування структури та властивостей твердих тіл в залежності від хімічного зв'язку та електронної структури атомів. Студенти знайомляться з класифікацією твердих тіл, природою сил відштовхування та притягання, типами модельних потенціалів міжчастинкової взаємодії та їх використання при розрахунку рівноважних властивостей кристалів інертних газів та іонних кристалів, системою кристалохімічних радіусів, моделями теплоємності Ейнштейна та Дебая. Пояснюється металічний зв'язок, класична модель металів Друде, квантова теорія вільного електрону, модель Зоммерфельда, принцип Паулі у формуванні енергетичного спектра електронів, застосування статистики Фермі-Дірака для опису електронної підсистеми, електронна теплоємність та парамагнетизм металів, основи зонної теорії твердих тіл. Обговорюються властивості кристалічних тіл та їх практичне застосування.

4. Завдання (навчальні цілі): Надати необхідний теоретичний базис для розуміння фізичних принципів формування структури та властивостей твердих тіл в залежності від хімічного зв'язку та електронної структури атомів. Навчити студентів здійснювати практичні розрахунки рівноважних властивостей кристалічних тіл. Ознайомити з сучасними прикладними застосуваннями та проблемами фізичної хімії конденсованого стану. Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК5, ЗК10 та СК1, СК4, СК5.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1 Знати фізичні принципи класифікації твердих тіл, роль енергетичного фактору та щільності пакування атомів у формування структури та властивостей твердих тіл, природу сил міжатомної взаємодії, типи модельних потенціалів міжатомної взаємодії.	Лекція, практичне заняття, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	20
1.2. Знати методологію розрахунку рівноважних	Лекція, практичне	Контрольна робота (питання з відкритими	20

властивостей кристалів інертних газів, іонних кристалів та металів. Термодинамічні властивості твердих тіл.	заняття, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	
1.3. Знати специфіку металічного зв'язку, основи теорії Друде та теорії Зоммерфельда, квантово-механічний підхід для опису поведінки електронів провідності. Розуміти основні засади зонної теорії твердих тіл.	Лекція, практичне заняття, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	20
2.1. Уміти використовувати кристалохімічні радіуси для прогнозування типу хімічного зв'язку, оцінювати щільність пакування атомів та параметри локального оточення атомів кристалів відомої структури.	Практичне заняття.	Перевірка завдань самостійної роботи.	15
2.2. Уміти використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, моделювання властивостей кристалічних систем, обробки експериментальних даних.	Практичне заняття.	Перевірка завдань самостійної роботи.	15
3.1. Здатність обговорювати з викладачем та колегами питання, що виникають в ході виконання практичних робіт.	Практичне заняття.	Перевірка завдань самостійної роботи.	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни					
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	3.1
P.04. Розуміти основні закономірності та типи хімічних реакцій і їх характеристики.	+	+	+			
P.07 Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.	+	+	+			
P.10. Застосовувати основні принципи термодинаміки та хімічної кінетики для вирішення професійних завдань.	+	+	+			
P.14. Здійснювати експериментальну роботу з метою перевірки гіпотез та дослідження хімічних явищ і закономірностей.				+	+	+
P.20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.				+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 2.1 – **15/9 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.3, РН 2.2 – **15/9 балів**.
3. Усна доповідь з презентацією: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 3.1 – **10/6 балів**.
4. Реферат: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3 – **5/3 бали**
5. Оцінювання самостійної роботи: РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1 – **15/9 балів**.

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: два теоретичних питання 20 балів, 5 тестових питань на 10 балів і однієї задачі на 10 балів.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів.

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він: набрав не менше, ніж 36 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **6 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **10 тижня** семестру;

Усна доповідь з презентацією та написання реферату виконується протягом семестру, але не пізніше, ніж за **2 тижні** до його закінчення;

Персональні завдання для написання реферату та усної доповіді з презентацією студенти отримують не пізніше, як за **8 тижнів** до закінчення семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і практичних занять

№ п/п	Назва лекцій	Кількість годин		
		Лекції	Практичні заняття	Самостійна робота
Класифікація твердих тіл, теплові властивості кристалічної ґратки металів				
1	Принципи класифікації твердих тіл. Енергія зв'язку. Кристали інертних газів – структура та властивості. Сили Ван дер Ваальса. Рівноважні властивості кристалів інертних газів.	3	1	5
2	Іонні кристали: структура та властивості. Електростатична енергія. Стала Маделунга. Повна енергія іонних кристалів.	3		5
3	Границі стабільності іонних структур. Кристали з ковалентним типом зв'язку – особливості структури та міжатомної взаємодії. Ступінь ковалентності. Системи кристалохімічних радіусів та їх практичне застосування.	3	2	5
4	Коливання атомів в одномірному ланцюжку з атомів одного сорту. Функція розподілу коливань за частотою. Акустичні та оптичні коливання. Кристалічна ґратка, зони Бріллюена.	3		5
5	Термодинамічні функції кристалічної ґратки, атоми якої здійснюють коливання. Моделі теплоємності Ейнштейна та Дебая. Контрольна робота №1	3	2	6
Метали. Зонна теорія твердих тіл.				
6	Металічний стан та його особливості. Основні положення моделі вільних електронів Друде. Електропровідність та теплопровідність металів в інтерпретації моделі Друде (закони Ома та Відемана-Франца).	3		5
7	Застосування статистики Максвелла-Больцмана до електронів провідності в металах. Недоліки моделі Друде. Квантова теорія вільного електрону. Модель металів Зоммерфельда. Властивості електронного газу в основному стані ($T=0$ К).	3	2	5
8	Застосування статистики Фермі-Дірака до електронів в металах ($T = 0$ К). Середня енергія електронів та її температурна залежність. Електронна теплоємність металів. Метод адіабатичного розмагнічування.	3	2	5
9	Енергетичний спектр електрона в періодичному потенціалі кристалічної ґратки металу та його фізична інтерпретація. Заповнення електронами зон Бріллюена. Контрольна робота №2.	4		6
Усього за дисципліною		28	14	47

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

Лекції – **28** год.

Практичні заняття – **14** год.

Консультації – **1** год.

Самостійна робота – **47** год.

9. Рекомендовані джерела

Основні:

1. Говорун Т.П., Пчелінцев В.О., Радзієвський В.М., Носонова Л.В. Фізика конденсованого стану матеріалів: навч. посіб. – Суми: СумДУ, 2015. – 236 с.
2. Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Самсонніков О.В. Структура неупорядкованих систем. Теорія та моделювання. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2009. – 319 с
3. Репецький С.П. Теорія твердого тіла. Неупорядковані середовища: навч. посіб. К.: Наукова думка, 2008. – 308 с.
4. Булавін Л. А. Властивості рідин у критичній області: навч. посіб. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2002. – 207 с.

Додаткові:

1. Atkins P., de Paula J. Atkins' Physical Chemistry. 8th Edition. – New York: W. H. Freeman and Company, 2006. – 1072 p.
2. Murty B.S., Yeh J.-W., Ranganathan S., Bhattacharjee P. P. High-Entropy Alloys, 2nd Edition. – Elsevier, 2019. – 388 p.
3. Булавін Л.А., Плевачук Ю.О., Склярчук В.М. Критичні явища розшарування в рідинах на Землі та в космосі. – Київ: Наукова думка, 2011. –278 с.