

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана  
навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ТЕОРІЯ ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ

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

5

Кількість кредитів ECTS

3

Мова викладання, навчання

та оцінювання

українська

Форма заключного контролю

іспит

Викладач: доцент Яцимирський А.В.

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

КИЇВ – 2022

Розробник: Яцимирський Андрій Віталійович, доц., к.х.н., доц.

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.** Це формування теоретичної бази для розуміння кількісних та якісних методів квантової хімії твердого тіла, теорії функціоналу електронної густини для періодичних структур. Формування практичних навичок при проведенні лабораторних робіт з побудови періодичних структур, підготовки ввідних файлів до їх обрахунків, обробки отриманих результатів. А також засвоєння основних положень теорії електронного газу, опис електропровідності, зонної теорії для кристалів методами статистичної фізики та квантової механіки (хімії).

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

Студенти повинні знати основи фізики та хімії, а також володіти необхідним математичним апаратом, включаючи інтегрування та диференціювання.

**3. Анотація навчальної дисципліни:** навчальна дисципліна розглядає теоретичний базис, який є необхідним для розуміння фізичного змісту та природи різноманітних явищ та процесів. В першу чергу це основні задачі (моделі) квантової механіки: “електрон в ящику”, атом водню, молекулярний іон водню. Поняття моделі електронного газу використовуються в інших спеціальних курсах, які викладаються на кафедрі після цього курсу. Студенти знайомляться із описом на основі статистичної термодинаміки та квантової механіки моделі електронного газу. Детально розглядаються так звані статистичні розподіли. Потім квантово-механічний опис, який виводить на поняття зонної теорії. А також супутні питання як то обернений простір, примітивні комірки тощо. Наприкінці курсу відбувається розгляд теорії Фермі-Дірака, яка є основою для методу ДФТ.

**4. Завдання (навчальні цілі):** Надати необхідний теоретичний базис для розуміння зонної теорії, моделі електронного газу, електронної густини. Та зв'язку між вище зазначеними характеристиками та хвильовою функцією системи.

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: ЗК1 та СК1, СК4, СК10.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

| Результати навчання<br>(1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація)  | Форми викладання і навчання                               | Методи оцінювання  | Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни |
|---|---|--|--|
| 1.1. Знати та розуміти формули розподілів Больцмана, Фермі-Дірака.  | Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури. | Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату. | 15   |
| 1.2. Знати стаціонарне рівняння Шредінгера та його застосування в т.зв. моделі “вільного електрону в ящику” | Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури. | Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з  | 15   |

|   |   |   |           |
|---|---|---|-----------|
| та умову нормування. Атомні одиниці довжини та енергії.   | літератури.   | презентацією;<br>перевірка завдань<br>самостійної роботи,<br>оцінювання реферату.   |           |
| 1.3. Знати та розуміти визначення енергії Фермі.  | Лекція,<br>самостійне<br>опрацювання<br>рекомендованої<br>літератури. | Контрольна робота<br>(питання з відкритими<br>відповідями);<br>усна доповідь з<br>презентацією;<br>перевірка завдань<br>самостійної роботи,<br>оцінювання реферату. | <b>10</b> |
| 1.4. Знати енергетичну густину розподілу станів електронів в твердому тілі. Поняття енергетичної зони та зонної моделі.   | Лекція,<br>самостійне<br>опрацювання<br>рекомендованої<br>літератури. | Контрольна робота<br>(питання з відкритими<br>відповідями);<br>усна доповідь з<br>презентацією;<br>перевірка завдань<br>самостійної роботи,<br>оцінювання реферату. | <b>10</b> |
| 2.1. Уміти вивести формули розподілів Больцмана, Фермі-Дірака.  | Лекція,<br>самостійне<br>опрацювання<br>рекомендованої<br>літератури. | Контрольна робота<br>(питання з відкритими<br>відповідями);<br>усна доповідь з<br>презентацією;<br>перевірка завдань<br>самостійної роботи,<br>оцінювання реферату. | <b>10</b> |
| 2.2. Уміти визначити межі застосування класичної (квазікласичної) статистики (статистичної термодинаміки).  | Лекція,<br>самостійне<br>опрацювання<br>рекомендованої<br>літератури. | Контрольна робота<br>(питання з відкритими<br>відповідями);<br>усна доповідь з<br>презентацією;<br>перевірка завдань<br>самостійної роботи,<br>оцінювання реферату. | <b>10</b> |
| 2.3. Уміти вивести формулу для кількості енергетичних станів (енергетичної густини розподілу станів) для електронів в металі та вміти визначити за графіком розподілу зон провідності тип твердого тіла: метал, ізолятори та напівпровідники. | Лекція,<br>самостійне<br>опрацювання<br>рекомендованої<br>літератури. | Контрольна робота<br>(питання з відкритими<br>відповідями);<br>усна доповідь з<br>презентацією;<br>перевірка завдань<br>самостійної роботи,<br>оцінювання реферату. | <b>10</b> |
| 2.4. Вміти обрахувати енергію Фермі для метала  | Лекція,<br>самостійне<br>опрацювання<br>рекомендованої<br>літератури. | Контрольна робота<br>(питання з відкритими<br>відповідями);<br>усна доповідь з<br>презентацією;<br>перевірка завдань  | <b>10</b> |

|   |                     |   |           |
|---|---------------------|---|-----------|
|   |                     | самостійної роботи,<br>оцінювання реферату. |           |
| 3.1. Здатність обговорювати з викладачем та колегами питання, що виникають в ході виконання лабораторних робіт. | Лабораторні роботи. | Захист лабораторних робіт.                  | <b>10</b> |

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни з програмними результатами навчання

| Програмні результати навчання   | Результати навчання дисципліни |     |     |     |     |     |     |     |     |  |
|---|--------------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|--|
|   | 1.1                            | 1.2 | 1.3 | 1.4 | 2.1 | 2.2 | 2.3 | 2.4 | 3.1 |  |
| P01. Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії. | +                              | +   | +   | +   | +   | +   |     | +   |     |  |
| P02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.  | +                              | +   |     |     | +   | +   |     |     |     |  |
| P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.   |                                | +   |     | +   |     | +   | +   |     |     |  |
| P07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.  |                                | +   |     | +   |     | +   |     |     |     |  |
| P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.  |                                | +   | +   | +   |     |     |     |     | +   |  |
| P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.   |                                |     |     |     |     |     |     |     | +   |  |

## 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 1.3, РН 1.4, РН 2.1-2.4 – **35/21 бал.**
2. Контрольна робота №2: РН 1.2, РН 2.2 – **25/15 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 1.1-1.4, РН 2.1-2.4.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: два теоретичних питання на 20 балів.

**Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою, ніж 24 бали.**

**Студент допускається до іспиту, якщо впродовж 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;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

## **7.3. Шкала відповідності оцінок**

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

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

| №  | Назва лекції  | Кількість годин |                 |
|--|---|-----------------|-----------------|
|  |   | лекції          | самоств. робота |
| <b>Квантовомеханічне моделювання твердого тіла</b> |   |                 |                 |
|  | <b>ВСТУП.</b> ОСНОВНІ ЗАДАЧІ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ  |                 |                 |
|  | <b>Лекція 1.</b> Атом водню. Основні властивості розв'язку рівняння Шредінгера. Водневоподібні функції.   | 4               | 3               |
|  | <b>Лекція 2.</b> Атом гелію. Варіаційний принцип. Принцип Борна-Оппенгеймера. Молекулярний іон водню.   | 4               | 3               |
|  | <b>Лекція 3.</b> Основні рівняння квантової механіки. Модель “вільного електрону в ящику”: 1 вимір та 3 виміри. Умова нормування.<br>Власні значення оператора імпульсу для а) відсутність граничних умов; б) в нормованому об'ємі; в) з періодичними умовами.  | 4               | 4               |
|  | <b>ТЕМА 1.</b> СТАТИСТИЧНИЙ ОПИС ІДЕАЛЬНОГО ГАЗУ З ЧАСТИНОК, ЩО ОПИСУЮТЬСЯ КВАНТОВОЮ МЕХАНІКОЮ. (КВАНТОВА СТАТИСТИКА ІДЕАЛЬНОГО ГАЗУ)   |                 |                 |
|  | <b>Лекція 4.</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.   | 4               | 3               |
|  | <b>Лекція 5.</b> Вивід розподілу Больцмана. Вивід розподілу Фермі-Дірака. Межі застосування класичної (квазікласичної) статистики (статистичної термодинаміки). Поняття фазового простору. Фазовий простір ідеального газу.   | 4               | 5               |
|  | <b>ТЕМА 2.</b> МОДЕЛЬ ВІЛЬНИХ ЕЛЕКТРОНІВ В МЕТАЛІ АБО МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ В МЕТАЛІ   |                 |                 |
|  | <b>Лекція 6.</b> 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 $0\text{ K}$ та при $T > 0$ від енергії. Визначення енергії Фермі. Метали, ізолятори та напівпровідники. Поняття енергетичної зони та зонної моделі. | 4               | 6               |
|  | <b>Лекція 7.</b> Статистична термодинаміка електронного газу в металі (Статистика електронного газу в металі). Обрахунок енергії Фермі. Уточнення графіків залежності розподілу Фермі-Дірака та кількості енергетичних станів при $T > 0$ від енергії.  | 4               | 6               |
|  | <b>ТЕМА 3.</b> КВАНТОВОМЕХАНІЧНИЙ ОПИС ТВЕРДОГО ТІЛА (МЕТАЛА). ЗОННА ТЕОРІЯ.  |                 |                 |
|  | <b>Лекція 8.</b> Нескінчений кристал. Електрон в періодичному полі. Рівняння  | 4               |                 |

|  |   |           |           |
|--|---|-----------|-----------|
|  | Шредінгера для кристала. Обернений простір — довідка. Зона Брилюена.  | 4         | 6         |
|  | <b>Лекція 9.</b> 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. | 4         | 6         |
|  | <b>Лекція 10.</b> 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.  | 6         | 6         |
|  | <b>ВСЬОГО</b>   | <b>42</b> | <b>48</b> |

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

Лекцій – **42 год.**

Самостійна робота - **48 год.**

## 9. Рекомендована література

### Основна:

1. Kittel C.. Introduction to solid state physics. 8th ed. – New York: J.Wiley&Sons, 2005. – 680 p.
2. Tien C.L., Lienhard J.H. Statistical thermodynamics. Hemisphere Publishing Company, 1979. –397 p.
3. Забуга В.Я. Статистична термодинаміка ідеальних газів. – Київ: ВПЦ «Київський університет», 1999. – 51с.
4. Яцимирський В.К., Яцимирський А.В. Квантова хімія. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2009. – 479 с.
5. Яцимирський В.К. Фізична хімія. – Київ, Ірпінь: Перун, 2010. – 511 с.
6. Slater J.C. Quantum Theory of Molecules and Solids. Volume 1, Electronic Structure of Molecules. – New York: McGraw-Hill Book Co., 1963. – 485 p.

### Додаткова:

7. Усенко Н.І., Роїк О.С. Статистична термодинаміка ідеального газу: теорія і задачі. – Київ: ВПЦ «Київський університет», 2007. – 51с.
8. Федорченко А.М. Теоретична фізика. Т. 2. Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. – Київ: Вища школа. – 1993. – 415 с.