

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
Львівський національний університет імені Івана Франка  
Факультет: хімічний  
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

«Затверджено»

На засіданні кафедри фізичної  
та колоїдної хімії Львівського  
національного університету  
протокол № 1  
від 31.08 2022р.

Завідувач кафедри фізичної  
та колоїдної хімії



О. РЕШЕТНЯК

СИЛАБУС З НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

«Будова речовини»

Освітньо професійна програма

«Хімія»

Першого (бакалаврського) рівня вищої освіти За спеціальністю 102-Хімія

Галузь знання 10 Природничі науки

Кваліфікація: Бакалавр хімії

**Силабус**  
**курсу «Будова речовини»**  
**навчального року 2022 – 2023 н.р.**

<b>Назва курсу</b>	<b>Будова речовини</b>
<b>Адреса викладання курсу</b>	Вул.. Кирила і Мефодія 6 ауд №3
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	Хімічний, кафедра фізичної та колоїдної хімії.
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10. Природничі науки 102- хімія.
<b>Викладачі курсу</b>	Дутка В.С., доктор хімічних наук, доцент, професор.
<b>Контактна інформація викладачів</b>	Електронна адреса <a href="mailto:vdutka@ukr.net">vdutka@ukr.net</a> .
<b>Консультації по курсу відбуваються</b>	Консультації в день проведення практичних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через Skype або подібні ресурси. Для погодження часу он-лайн консультацій слід писати на електронну пошту викладача або дзвонити.
<b>Сторінка курсу</b>	
<b>Інформація про курс</b>	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам необхідні знання, основ будови молекул які є обов'язкові для того, щоб вміти розраховувати структуру молекул, дипольні моменти, ІЧ- та УФ-спектри. Тому у курсі Будова речовини представлено як огляд концепцій, так перелічуються інструменти, які потрібні для розрахунку ти чи інших параметрів. .
<b>Коротка анотація курсу</b>	Дисципліна «Будова речовини» є завершальною вибірковою дисципліною з спеціальності 102 -Хімія для освітньої програми хімії, яка викладається в 11 семестрі в обсязі 4 кредити (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
<b>Мета та цілі курсу</b>	Метою вивчення вибіркової дисципліни «Будова речовини» є ознайомлення студентів із завданнями будови молекул для оволодіння сучасними підходами та інструментами для їх вирішення та застосуванням на практиці.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<p style="text-align: center;"><b>Основна література</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Яцимирський К.Б., Яцимирский В.К. Хімічний зв'язок. К. Вища школа. 1992. с. 246.</li> <li>2. Татевский В.М. Будова молекул. – М: Химия, 1977. – 512 с.</li> <li>3. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Будова речовини. – М.: Вища школа, 1978. – 304 с.</li> <li>4. Краснов К.С. Молекули та хімічний зв'язок. – М.: Вища школа, 1977. – 295 с.</li> </ol> <p style="text-align: center;"><b>Додаткова література</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. П.Уитли. Определение молекулярной структуры. М.: Мир, 1970. – 296 с.</li> <li>2. Коряжкин В.А. Электронные спектры молекул (Введение в анализ</li> </ol>

	<p>электронных спектров двухатомных и простейших молекул). – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1984. – 160 с.</p> <p>3. Друтман З.С. Строение молекул. – Львов.: Изд-во Львов. ун-та, 1962. – 215 с.</p> <p>4.Картмелл Э., Фоулс Г.В.А. Валентность и строение молекул. – М.: Химия, 1978. – 360 с.</p> <p>4.Хабердитцл В. Строение материи и химическая связь. – М.: Мир, 1974. – 296 с.</p> <p>5. Эрдеи-Груз Т. Основы строения материи. – М.: Мир, 1976. – 488 с</p> <p>6. Флайгер. Строение и динамика молекул. В 2-х т.</p> <p>5. Минкин, Осипов, Жданов. Дипольные моменты в органической химии. М.: Химия, 1965.</p> <p>6. Борлтруп Д. Возбужденные состояния в органической химии. – М.: Мир, 1974. –</p> <p>7. Кукушкин А.К. Задачник по квантовой химии и строению молекул.</p> <p>8. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. – Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1987. – 216 с.</p> <p>11.. Leach A.R. Molecular modeling. Longman. 1996. 596 p.</p> <p>12. Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів. 2007. с.848.</p> <p>13. Туровський М.А., Туровська О.М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Донецьк. 2004. с.131.</p> <p>14. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высшая школа. 1979, с.407. 2008. 383 с.</p> <p>15. Fleming Jan Molecular Orbitals and Organic chemical Reaction. 2010. 515 p.</p> <p>16. Jensen Frank Introduction to Computation chemistry. Wiley. 2007. 599.</p> <p>17. Nguen Trong Anh. Frontier orbitals. A practical manual. Wiley. 2007. 304.</p> <p>18. Piela L. Idee chemii kwantowej. Warszawa. Wyd. PWN. 2006. p. 1137.</p> <p>19. Frank L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry. Nj. 1990. p.589.</p> <p><b>Интернет ресурси</b></p> <p>1. <a href="http://www.elsevier.com">www.elsevier.com</a></p> <p>2. <a href="http://www.wiley.com">www.wiley.com</a></p> <p>3. <a href="http://pubs.acs.org/">http://pubs.acs.org/</a></p> <p>4. <a href="http://chemetal-journal.org/">http://chemetal-journal.org/</a></p> <p>5. <a href="http://chem.lnu.edu.ua/visnykk/index.htm">http://chem.lnu.edu.ua/visnykk/index.htm</a></p> <p>6. <a href="http://nbuv.gov.ua/">http://nbuv.gov.ua/</a></p> <p>7. <a href="http://www.sciencedirect.com/">http://www.sciencedirect.com/</a></p> <p>8. <a href="https://www.scopus.com/">https://www.scopus.com/</a></p> <p>9. <a href="http://webofknowledge.com/">http://webofknowledge.com/</a></p> <p>10. <a href="https://www.researchgate.net/">https://www.researchgate.net/</a></p> <p>11. <a href="https://mon.gov.ua">https://mon.gov.ua</a></p>
<b>Тривалість курсу</b>	92 год. один семестр.
<b>Обсяг курсу</b>	32 годин аудиторних занять. 3 них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних робіт занять та 60 годин самостійної роботи
<b>Очікувані</b>	Після завершення цього курсу студент буде :

**результати  
навчання**

**- Знати**

- елементи будови молекулярних структур;
- методи визначення будови молекул, дипольних моментів, розрахунків оптимальної геометричної структури, електронних характеристик молекул, спектральних характеристик молекул;
- основні положення предмету будова речовини та їхнє застосування;

**- Вміти**

- застосовувати розрахункові методи будови речовини;
- інтерпретувати результати розрахунків;
- прогнозувати спектральні властивості атомів та молекул;
- прогнозувати структуру молекул та іонів;
- прогнозувати реакційну здатність молекул та іонів.

У результаті успішного вивчення курсу студент набуде **загальних компетентностей**:

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу на основі логічних аргументів та перевірених фактів.

ЗК 2. Здатність вчитися впродовж життя і оволодіювати сучасними знаннями..

ЗК 3. Гнучкість мислення.

ЗК 7. Здатність здійснювати математичні розрахунки, оцінку та аналіз помилок, правильно використовувати одиниці та представлення даних.

ЗК 8. Навики у області застосування інформаційно комунікаційних технологій для обробки хімічних даних.

ЗК 14. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел;

**та спеціальних (фахових) компетентностей:**

СК1. Розуміння ключових хімічних понять, основних фактів, концепцій, принципів і теорій, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, для можливості у подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.

СК 5. Навики у практичному застосуванні теоретичних відомостей.

СК 6. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та модулювання в хімії.

СК11. Здатність до опанування нових областей шляхом самостійного навчання.

**Програмні результати навчання:**

-ПР3 1 Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних наук

-ПР3 2 Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні достатньому для використання у різних сферах хімії.

- ПР35 Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин.

- ПР37 Знати основні принципи квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будова атома, молекул та хімічного

	<p>зв'язку..</p> <p>ПРК4 Здатність до інтерпретації своїх результатів.</p> <p>ПРУ3 Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунку, відображення та моделювання хімічних систем та процесів. Обробки експериментальних даних.</p> <p>ПРУ4. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне спеціальне програмне за безпечення, навички аналізу та відображення результатів.</p>
<b>Ключові слова</b>	Будова молекул, спектри, дипольні моменти, характеристики молекул
<b>Формат курсу</b>	Очний
	Проведення лекцій, лабораторних робіт та розрахункові роботи, консультації для кращого розуміння тем
<b>Теми</b>	<p>1 Предмет та завдання курсу «Будова речовини » Основні досягнення та проблеми будови речовини. Обчислення структури та енергії молекул. Класифікація хімічних частинок. Розвиток теорії будови речовини. Ізомерія та її види. Основні характеристики хімічного зв'язку: довжина та енергія. Рівноважний стан молекули. Довжини зв'язку. Міцність хімічного зв'язку.</p> <p>2. Просторова структура хімічних частинок. Радіуси атомів та їхні значення. Просторове розміщення атомів в молекулі. Міжядерні віддалі, плоскі кути та дієдральні кути. Молекулярна механіка. Іонний зв'язок. Загальна характеристика іонного зв'язку. Енергетика йонних кристалів. Поляризація йонів. Вплив поляризації на властивості речовин.</p> <p>3. Електричні властивості молекул. Власний дипольний момент молекул. Дипольний момент та симетрія молекул. Молярна рефракція Експериментальне визначення дипольних моментів. Застосування дипольних моментів. Магнітні властивості молекул. Магнітна сприйнятливості молекул. Діамагнетики та парамагнетики. Експериментальне визначення магнітної сприйнятливості молекул. Неспецифічні міжмолекулярні взаємодії.</p> <p>4. Природа міжмолекулярних взаємодій. Орієнтаційні взаємодії, індукційні взаємодії, дисперсійні взаємодії. Енергія міжмолекулярних взаємодій. Йон – молекулярна взаємодія. Молекулярна спектроскопія. Загальна характеристика електронних спектрів. Поглинання та випромінювання світла та молекулярні спектри.</p> <p>5. Раманова спектроскопія (комбінаційне розсіювання). Правила відбору. Застосування молекулярної спектроскопії.. Обертальні спекри. Момент інерції. Жорсткий ротатор. Енергія обертання двоатомних молекул. Нежорсткий ротатор. Вплив ізотопного складу на обертальні спектри молекул. Конформаційний аналіз.</p> <p>6. Коливально- обертальні спектри багатоатомних молекул. Обертальні спектри комбінаційного розсіювання лінійних молекул. Загальна характеристика електронних спектрів молекул. Правила відбору під час електронних переходів. Визначення енергії дисоціації. відношення структура – активність</p> <p>7. Магнітно-спінова (спін резонансна) спектроскопія. Принцип магнітно-резонансної спектроскопії. ЕПР та ЯМР спектроскопії.</p>

	<p>Водневий зв'язок Загальна характеристика водневого зв'язку. Вплив водневого зв'язку на фізико-хімічні параметри речовин.  Внутрішньомолекулярний водневий зв'язок.  8.. Хімія «хазяїн – гість». Рецептори, координація «замок – ключ».  Природа взаємодій. Йон-йонні, йон – дипольні, диполь- дипольні , катіон – <math>\pi</math>- взаємодії.</p>																																											
<p><b>Підсумковий контроль, форма</b></p>	<p>залік в кінці семестру  усний, комбінований</p> <p><b>Оцінювання підготовленості студентів.  Розрахункові індивідуальні завдання</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">№ з/п</th> <th rowspan="2">Види розрахункових робіт</th> <th colspan="3"></th> </tr> <tr> <th>Зміст лабораторних</th> <th>Форма звітності</th> <th>Сума балів</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>Структурні елементи молекул</td> <td>Обчислення міжатомних віддалей, плоских кутів ліедральних кутів</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Використання теорії гібридизації для прогнозування будови молекул</td> <td>Типи гібридизації та їхнє застосування</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Розрахунок фізико-хімічних параметрів молекул та їх порівняння з експериментальними даними.</td> <td>Фізико-хімічні властивості молекул</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>Дипольні моменти. Розрахунок дипольних моментв.</td> <td>Дипольні моменти та їхня інтерпретація</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>Енергетичні властивості молекул</td> <td>Теплоти утворення речовин ті їхнє порівняння з експериментальними даними</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>Розрахунок коливальних спектрів простих молекул</td> <td>Спектри молекул</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> <tr> <td>7.</td> <td>Розрахунок теплових ефектів для простих реакцій</td> <td>Теплові ефекти реакцій</td> <td>Звіт за роботу</td> <td>10</td> </tr> </tbody> </table>	№ з/п	Види розрахункових робіт				Зміст лабораторних	Форма звітності	Сума балів	1	Структурні елементи молекул	Обчислення міжатомних віддалей, плоских кутів ліедральних кутів	Звіт за роботу	10	2	Використання теорії гібридизації для прогнозування будови молекул	Типи гібридизації та їхнє застосування	Звіт за роботу	10	3	Розрахунок фізико-хімічних параметрів молекул та їх порівняння з експериментальними даними.	Фізико-хімічні властивості молекул	Звіт за роботу	10	4	Дипольні моменти. Розрахунок дипольних моментв.	Дипольні моменти та їхня інтерпретація	Звіт за роботу	10	5	Енергетичні властивості молекул	Теплоти утворення речовин ті їхнє порівняння з експериментальними даними	Звіт за роботу	10	6	Розрахунок коливальних спектрів простих молекул	Спектри молекул	Звіт за роботу	10	7.	Розрахунок теплових ефектів для простих реакцій	Теплові ефекти реакцій	Звіт за роботу	10
№ з/п	Види розрахункових робіт																																											
		Зміст лабораторних	Форма звітності	Сума балів																																								
1	Структурні елементи молекул	Обчислення міжатомних віддалей, плоских кутів ліедральних кутів	Звіт за роботу	10																																								
2	Використання теорії гібридизації для прогнозування будови молекул	Типи гібридизації та їхнє застосування	Звіт за роботу	10																																								
3	Розрахунок фізико-хімічних параметрів молекул та їх порівняння з експериментальними даними.	Фізико-хімічні властивості молекул	Звіт за роботу	10																																								
4	Дипольні моменти. Розрахунок дипольних моментв.	Дипольні моменти та їхня інтерпретація	Звіт за роботу	10																																								
5	Енергетичні властивості молекул	Теплоти утворення речовин ті їхнє порівняння з експериментальними даними	Звіт за роботу	10																																								
6	Розрахунок коливальних спектрів простих молекул	Спектри молекул	Звіт за роботу	10																																								
7.	Розрахунок теплових ефектів для простих реакцій	Теплові ефекти реакцій	Звіт за роботу	10																																								
<p><b>Пререквізити</b></p>	<p>Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з вищої математики, фізики, інформатики, фізичної хімії, квантової механіки та квантової хімії дисциплін, достатніх для сприйняття категоріального апарату «<b>Будова речовини</b>», розуміння джерел з даного предмету.</p>																																											

<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	Презентація, лекції, лабораторивне роботи, розрахункові роботи семінари з обговорення отриманих результатів. навчання (форми – індивідуальні проекти).
<b>Необхідне обладнання</b>	Із урахуванням особливостей навчальної дисципліни. Вивчення курсу може не потребувати використання програмного забезпечення, крім загально вживаних програм і операційних систем. Квантово-хімічні програми
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• практичні/самостійні тощо : 70 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 70 .</li> <li>• контрольні заміри (модулі): 10 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів 10</li> <li>• залік: 20% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів <u>20</u></li> </ul> <p>Підсумкова максимальна кількість балів 100.</p> <p><b>Письмові роботи:</b> Очікується, що студенти виконають декілька видів письмових робіт (есе, вирішення кейсу). <b>Академічна доброчесність:</b> Очікується, що роботи студентів будуть їх оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Відсутність посилань на використані джерела, фабрикування джерел, списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів плагіату чи обману. <b>Відвідання занять</b> є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків визначених для виконання усіх видів письмових робіт, передбачених курсом. <b>Література.</b> Уся література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p><b>Політика виставлення балів.</b> Враховуються бали набрані на поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час практичного заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
<b>Питання до заліку чи екзамену.</b>	Наводиться перелік питань та завдань для проведення підсумкової оцінки знань. Також можна надати посилання на веб-сторінку де

	<p>розміщені вказані матеріали.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Які елементи характеризують структуру молекули.</li> <li>2. Наведіть основні положення теорії гібридизації.</li> <li>3. Як розраховують дипольні моменти.</li> <li>4. Що таке молекулярна рефракція. Де застосовують цей параметр?</li> <li>5. Наведіть види поляризації.</li> <li>6. Запишіть та прокоментуйте криву потенціальної енергії для двоатомної молекули.</li> <li>7. Які параметри характеризують хімічний зв'язок.</li> <li>8. Перелічіть відомі Вам типи хімічних зв'язків.</li> <li>9. Яка природа ІЧ-спектрів.?</li> <li>10. Що таке електронегативність ? Як визначають цей параметр?.</li> <li>11. Охарактеризуйте магнітні властивості молекул.</li> <li>12. Опишіть рівняння, які характеризують жорсткий ротатор.</li> <li>13. Дайте характеристику електронних спектрів.</li> <li>14. Дайте характеристику міжмолекулярних взаємодій.</li> <li>15. Як виникає водневий зв'язок? Наведіть приклади</li> <li>16. Що таке конформації. Як визначається найбільш стійка конформація.</li> <li>17. Які види взаємодій розглядає предмет «Будова речовини».</li> <li>18. Дайте загальну характеристику ковалентного зв'язку.</li> <li>19. Що таке тепловий ефект реакції? Як його обчислюють?</li> <li>20. Спектри комбінаційного розсіяння.</li> </ol>
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

#### \*ПРИМІТКА

*Зовнішня форма вираження силябусу може бути відмінною та поданою до візуального сприйняття не лише у формі таблиці. Бажаним є дотримання самої структури. Можливе наповнення силябусу додатковими розділами із розширенням інформації про курс. Запропонована форма є лише зразком.*

*\*\* Схема курсу*

Тиж. / дата / год.-	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності (заняття)* *лекція, самостійна, дискусія, групова робота)	Література.*** Ресурсив інтернеті	Завдання, год	Термін виконання
1	Предмет та завдання курсу «Будова речовини» Основні досягнення та проблеми будови речовини.	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Обчислення міжатомних віддалей, плоских кутів лідральних кутів	1 тиждень
3	Просторова структура	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Типи гібридизації та їхнє застосування	1 тиждень



	хімічних частинок. Радіуси ато мів та їхні значення. Просторове розміщення атомів в молекулі.				
5	Електричні властивості молекул. Власний дипольний момент молекул.	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Фізико-хімічні властивості молекул	
7	Природа міжмолекулярних взаємодій. Орієнтаційні взаємодії, індукційні взаємодії, дисперсійні взаємодії.	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Фізико-хімічні властивості молекул	1 тиждень
9	. Раманова спектроскопія (комбінаційне розсіювання).	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Дипольні моменти та їхня інтерпретація	1 тиждень
11	Колівально-обертальні спектри багатоатомних молекул.	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Теплоти утворення речовин ті їхнє порівняння з експериментальними даними	
13	Водневий зв'язок Загальна характеристика водневого зв'язку.	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Спектри молекул	
15	Природа взаємодій. Йон-йонні, йон – дипольні, диполь-дипольні, катіон – $\pi$ - взаємодії.	Лекція Практичне заняття	Література [1-4], та Інтернет ресурс	Теплові ефекти реакцій	