



**Склад, будова і властивості хімічних сполук в харчових  
добавках та косметичній продукції**  
**Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)**

**Реквізити навчальної дисципліни**

Рівень вищої освіти	Бакалаврат
Галузь знань	16 Хімічна та біоінженерія
Спеціальність	161 Хімічні технології та інженерія
Освітня програма	Хімічні технології косметичних засобів та харчових добавок
Статус дисципліни	Вибіркова
Форма навчання	змішана
Рік підготовки, семестр	3 курс, осінній семестр
Обсяг дисципліни	4 кредити
Семестровий контроль/ контрольні заходи	залік письмовий
Розклад занять	Лекція 2 години на тиждень (1 пара) лабораторний практикум 1 год на тиждень rozklad.kpi.ua
Мова викладання	Українська/Англійська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектори: к.х.н., доцент Бережницька Олександра Степанівна, olekberez@gmail.com телеграм: +380969315890 Лабораторний практикум: к.х.н., доцент Бережницька Олександра Степанівна, olekberez@gmail.com телеграм: +380969315890
Розміщення курсу	Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky- distance); <a href="https://do.ipk.kpi.ua/course/view.php?id=4801">https://do.ipk.kpi.ua/course/view.php?id=4801</a> доступ за запрошенням викладача

**Програма навчальної дисципліни**

**1.Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання**

**Предмет** навчальної дисципліни –

В той же час дисципліна формує у студентів критичне мислення, вміння аналізувати та інтерпретувати результати власних наукових досліджень.

**Предмет дисципліни:** систематизація та узагальнення знань з природи та характеристики хімічного зв'язку, способів та методів визначення енергії, довжини, природи та кратності зв'язку, взаємозв'язку властивості – електронна будова; хімічні сполуки як компоненти косметичних засобів та біодобавок встановлення їх складу та будови з використанням фізико-хімічних методів аналізу, їх вплив на властивості косметичних композицій та БАДів.

#### **Мета та завдання навчальної дисципліни**

- Здатність обробляти результати експериментів за допомогою сучасних статистичних методів та програмних засобів (ФК 7);

- Здатність використовувати знання хімії високомолекулярних сполук та теорії хімічного зв'язку для вирішення практичних задач хімічної технології косметичних засобів та харчових добавок (ФК 15).

Основні завдання навчальної дисципліни.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми студенти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

#### **знання:**

- теорії будови хімічних речовин, основних законів квантової механіки та квантової хімії з наголосом на електронну будову атомів і молекул;
- основних теорій та механізмів утворення хімічного зв'язку;
- координативні сполуки – основні поняття;
- ізомерія, номенклатура, будова, основні методи синтезу координаційних сполук;
- взаємозв'язку між електронною будовою атомів та природою хімічного зв'язку;
- використовувати сучасні методи ІЧ-, УФ-, ЕСП- для встановлення будови речовин;
- методи обробки та інтерпретації даних експериментальних досліджень, поняття кореляції;

#### **уміння:**

- спираючись на базові поняття та закони дисципліни встановлювати тип, полярність, поляризованість та довжину зв'язку;
- планувати експеримент спираючись на знання теорії хімічного зв'язку;
- проводити кореляції між будовою та властивостями сполук;
- проводити розрахунки просторової електронної будови молекул
- обирати та вдосконалювати методики синтезу;
- встановлювати склад та будову сполук;
- розраховувати параметри зв'язку;
- встановлення основних закономірностей реакційної здатності молекул в залежності від її полярності, дипольного моменту;
- аналізувати спектральні результати з позиції хімічного зв'язку проводити кореляції та встановлювати закономірності.

## **2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)**

Зазначається перелік дисциплін, знань та умінь, володіння якими необхідні студенту для успішного засвоєння дисципліни:

Фізика	Основні закони та поняття (квант, частинка, атом, поляризація, плазмонні переходи, енергія, енергетичні переходи)
Хімія (загальна,	Знання хімічного зв'язку, особливості поведінки систем в розчині, механізмів та типів реакції, реакційної здатності речовин, методів синтезу дисперсних систем,

органічна, неорганічна, фізична, колоїдна)	термодинаміки поверхневих явищ, понять міцела, частинка, золь тощо.
---	---

Перелік дисциплін, які базуються на результатах навчання з даної дисципліни.

Дана дисципліна дозволяє підсумувати та закріпити знання з усіх раніше вивчених хімічних дисциплін. Знання та навички отримані при вивченні дисципліни дозволяють студенту самостійно розробляти та аналізувати склад косметичних композицій, зокрема вдосконалювати існуючі на ринку та створювати нові конкурентно здатні композиції.

### **3. Зміст навчальної дисципліни**

#### **Розділ 1. ТЕОРІЯ ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ.**

##### **Тема 1.1. Історія розвитку вчення про хімічний зв'язок. Будова речовини.**

Теорії І.Я.Берцеліуса, А.М.Бутлерова. Гіпотеза Г.Н.Льюїса. Теорія електронегативності Л.Полінга. Будова речовини. Властивості світла.

##### **Тема 1.2. Електронна будова атома**

Будова атома по Бору. Спектр атома водню. Вдосконалення теорії Бора. Електронні хвилі. Принцип невизначеності Гейзенберга. Хвильова функція. Хвильове рівняння Ервінга Шредінгера. Радіальна та кутова частини хвильової функції. Орбіталі. Спін електрона. Теорія багатоелектронних атомів. Принцип Паулі та періодична система. Квантові числа. Енергетичні рівні в атомах. Терми Рассела-Саундерса. Виведення системи термів для заданої електронної конфігурації. Виведення основного терма для заданої електронної конфігурації. Правила Хунда. Потенціал іонізації. Спорідненість до електрона. Спін-орбітальна взаємодія.

##### **Тема 1.3. Ковалентний, іонний зв'язок, металічний та водневий зв'язок.**

Метод молекулярних орбіталей. Зв'язуючі та розпушуючі молекулярні орбіталі водню. Молекула водню: довжина зв'язку, енергія та магнітні властивості. Енергія зв'язку. Довжина зв'язку і ковалентні радіуси. Зв'язок і молекулярна полярність. Ван-дер-Ваальсові радіуси. Дипольні моменти. Електронегативність. Іонний зв'язок. Проста іонна модель галогенідів. Іонні кристалічні ґратки, енергії. Інші види електростатичних взаємодій.

##### **Тема 1.4. Теорія валентних зв'язків та метод молекулярних орбіталей.**

Зв'язок, утворений парю електронів по Льюїсу. Двохелектронні зв'язки з точки зору квантової механіки. Енергія збудження і валентні стани. Критерій перекивання та міцності зв'язків. Гібридизація. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО). Гомо- та гетероядерні двохатомні молекули.

##### **Тема 2.4. Багатоатомні молекули з локалізованими зв'язками**

Метод валентних зв'язків. Донорно-акцепторний зв'язок. Спрямовані валентності.

##### **Тема 2.5. Молекули з делокалізованими зв'язками.**

Молекули з насиченими та ненасиченими зв'язками, ароматичні сполуки. Енергії молекулярних орбіталей. Міцність та кратність зв'язку. Порядки зв'язків та індекси вільної валентності. Багатоатомні молекули.  $\sigma$ - та  $\pi$ -орбіталі. Залежність властивостей молекули від основних характеристик зв'язку.

##### **Тема 2.6. Поняття про симетрію.**

Елементи симетрії. Операції симетрії. Таблиці характерів.

#### **Розділ 3. ЕЛЕКТРОННА БУДОВА ТА ВЛАСТИВОСТІ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК**

##### **Тема 3.1. Основні поняття. Будова, ізомерія, номенклатура.**

Вступ. Основні поняття координаційної хімії: центральний атом, ліганд, внутрішня та зовнішня сфери, координаційне число та ступінь окиснення центрального атома, координаційна формула. Історія відкриття комплексних

сполук. Деякі особливості f- та d- орбіталей. Координаційні числа і симетрія. Типи лігандів. Ізомерія. Будова координаційного поліедру. Елементи номенклатури.

### **Тема 3.2. Хімічний зв'язок в координаційних сполуках**

Теорія хімічного зв'язку в комплексах. Координаційна теорія

Вернера. Ефективний атомний номер. Електростатична теорія Косселя.

Поляризаційна теорія. Теорія жорстких і м'яких кислот та основ Пірсона. Теорія валентних зв'язків. Теорія кристалічного поля. Теорія поля лігандів.

Кількість d-електронів. Слабкі та сильні поля. Фізико-хімічні властивості сполук з позиції теорії кристалічного поля. Хелатний та макроциклічний ефекти. Октаедричні, плоско квадратні та тетраедричні комплекси. Ліганди слабого та сильного поля. Ряд Ірвінга-Вільямса. Теорія поля лігандів. Метод валентних зв'язків. Магнітні властивості. Типи  $\pi$ -зв'язування в комплексних сполуках. Обмін лігандами. Стійкість координаційних сполук в розчині.

**Тема 3.3** Основні типи комплексів. Ацидокомплекси. Гідроксидні, оксидні та халькогенідні комплекси. Карбонільні, нітрозильні, ціанідні комплекси. Солі Кругманна. Комплекси з лігандами, що координовані за рахунок  $\sigma$ -зв'язку.

Карбенові комплекси, комплекси з кратними зв'язками метал-карбон.  $\pi$ -

Комплекси, металоцени. Комплекси. Комплекси з макроциклічними поліетерами та криптандами. Електриди. Поліядерні комплекси. Кластери.

**Тема 3.4.** Основні методи синтезу комплексів. Темплатний синтез. Механізми реакцій заміщення лігандів. Транс- та цис-ефекти.

**Тема 3.5.** Дослідження координаційних сполук методом ІЧ-спектроскопії

**Тема 3.6.** Метод електронної спектроскопії поглинання, встановлення будови координаційного поліедру.

**Тема 3.7.** Диференціальний термічний аналіз, як спосіб встановлення гідратного складу комплексів.

**Тема 3.8.** Метод ЕПР спектроскопії для дослідження будови координаційних сполук.

### **Практичні заняття**

1. Просторова інтерпретація координаційних чисел. Теоретичні методи дослідження просторової будови комплексів. Ізомерія комплексів: геометрична ізомерія, структурна ізомерія, координаційна ізомерія, координаційна полімерія, сольватна ізомерія, іонізаційна ізомерія, сольова ізомерія, валентна ізомерія, конформаційна та спінова ізомерія.
2. Метод валентних зв'язків. Теорія кристалічного поля. Задачі по магнітним та оптичним властивостям залежно від типу лігандів, ЦА та координаційного поліедру. Розщеплення d-підрівня в полях різної симетрії. Теорема Яна–Телера.
3. Синтез координаційних сполук.
4. Дослідження синтезованих комплексів методами УФ-, ІЧ-спектроскопії та кондуктометрії. Електронні спектри комплексів.
5. Методи магнетохімії в хімії комплексів. Розрахунки спінової рівноваги та магнетичного внеску в термодинамічні функції – ізобарно-термічний потенціал, ентальпія та ентропія перетворення високоспінового комплексу на низькоспіновий.

### **4. Навчальні матеріали та ресурси**

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та в електронному варіанті у камусі. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

1. К.Б.Яцимірський, В.К.Яцимірський «Хімічний зв'язок», К.: «Вища школа», 1993.- 309с.
2. Г.Грей «Електрони и химическая связь», М.: Мир, 1967. – 236с.

3. Слета Л.А., Иванов В.В. Квантовая химия. Харьков, Фолио, 2007, 443 с.
4. Ф.Коттон, Дж.Уилкинсон Современная неорганическая химия, М: «Мир», - 1969.- 224с.
5. В.В.Скопенко, Л.І.Савранський. Координаційна хімія. К., Либідь, 2004,-424с.
6. Лабораторний практикум Квантово-хімічне моделювання сполук в пакеті Nucleus. Учебное пособие. ФГБУ ВПО Кемеровский государственный университет, А.Л.Юдин, Кемерово. -2013, - 175с.
7. В.В.Скопенко, В.Я.Зуб Координаційна хімія, Практикум, Підручник. –К.:Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2002. – 332 с.
9. К.Б.Яцимирський, Н.А.Костромина, З.А.Шека, Н.К.Давиденко, Е.Е.Крисс, В.И.Ермоленко Химия комплексных соединений редкоземельных элементов, К.:Наукова думка,- 1966. – 496с.
10. Костромина Н. А. Химия координационных соединений / Н.А. Костромина, В.Н. Кумок, Н.А. Скорик. – М.: Высшая школа, 1990 – 432 с.
11. Скопенко В. В. Координаційна хімія / В.В. Скопенко, Л.І. Савранський. – К.: Либідь, 2004 – 423 с.
12. Стародуб В. А. Общая химия / В.А. Стародуб. – Х.: Фолио, 2007 – 378 с.
13. Алексеев С.О. Хімія координаційних сполук / С.О. Алексеев. – К.: ВПЦ Київський університет, 2010 – 159 с.
14. Скопенко В.В. Координаційна хімія. Практикум / В.В. Скопенко, В.Я. Зуб. – К.: Київський університет, 2002 – 332 с.

#### **Інформаційні ресурси**

Дистанційний курс Google G Suite for Education. Режим доступу: Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance);  
<https://classroom.google.com/c/MTUyNzUzNjU5MzY3?cjc=xu3tnft>  
<https://do.ipk.kpi.ua/course/view.php?id=2787>

### **Навчальний контент**

#### **5.Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)**

Надається інформація (за розділами, темами) про всі навчальні заняття (лекції, практичні, семінарські, лабораторні) та надаються рекомендації щодо їх засвоєння (наприклад, у формі календарного плану чи деталізованого опису кожного заняття та запланованої роботи).

#### **Лекційні заняття**

Вивчення лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами лабораторного практикуму та розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance [9]. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Дата	Опис заняття
1	06.09.2021	<b>Розділ 1. ВСТУП ДО ТЕОРІЇ ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ</b> <b>Тема 1.1. Історія розвитку вчення про хімічний зв'язок. Будова речовини.</b> Теорії І.Я.Берцеліуса, А.М.Бутлерова. Гіпотеза Г.Н.Льюїса. Теорія електронегативності Л.Полінга. Будова речовини. Властивості світла. Основні типи хімічного зв'язку. Література: [1, с. 3-10, допоміжна 4].
2.	13.09.2021	<b>Тема 1.2. Електронна будова атома.</b> Будова атома по Бору. Спектр атома водню. Вдосконалення теорії Бора. Електронні хвилі. Принцип невизначеності Гейзенберга. Хвильова функція. Хвильове рівняння Ервінга Шредінгера. Радіальна та кутова частини хвильової функції. Орбіталі. Спін електрона.

		Теорія багатоелектронних атомів. Література: [1, с. 10-13;16-18; 32-38; 2, с. 9-30; допоміжна 4 ].
3.	20.09.2021	Принцип Паулі та періодична система. Квантові числа. Енергетичні рівні в атомах. Терми Рассела-Саундерса. Виведення системи термів для заданої електронної конфігурації. Виведення основного терма для заданої електронної конфігурації. Правила Хунда. Потенціал іонізації. Спорідненість до електрона. Спін-орбітальна взаємодія. Література: [1, с. 56-81; 2, с. 31-47; допоміжна 4, с.39-49 ].
4.	27.09.2021	<b>Розділ 2. ДВОХАТОМНІ МОЛЕКУЛИ. ПРИРОДА ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ</b> <b>Теми 2.1. та 2.2. Ковалентний та іонний зв'язок.</b> Метод молекулярних орбіталей. Зв'язуючі та розпушуючі молекулярні орбіталі водню. Молекула водню: довжина зв'язку, енергія та магнітні властивості. Енергія зв'язку. Довжина зв'язку і ковалентні радіуси. Зв'язок і молекулярна полярність. Ван-дер-Ваальсові радіуси. Дипольні моменти. Електронегативність. Іонний зв'язок. Проста іонна модель галогенідів. Іонні кристалічні ґратки, енергії. Інші види електростатичних взаємодій. Література: [1, с. 84-104; 2, с. 48-69; 88-91; допоміжна 4, с.118-138].
5.	04.10.2021	<b>Тема 2.3. Теорія валентних зв'язків та метод молекулярних орбіталей</b> Зв'язок, утворений парою електронів по Льюїсу. Двохелектронні зв'язки з точки зору квантової механіки. Енергія збудження і валентні стани. Критерій перекривання та міцності зв'язків. Гібридизація. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО). Гомо- та гетероядерні двоатомні молекули. Література: [1, с. 131-138; 157-165, 2, с. 51-59, с. 62-73, допоміжна 4 с.75-117; ].
6.	11.10.2021	<b>Тема 2.4., 2.5 Багатоатомні молекули з локалізованими та делокалізованими зв'язками</b> Метод валентних зв'язків. Донорно-акцепторний зв'язок. Спрямовані валентності. Молекули з насиченими та ненасиченими зв'язками, ароматичні сполуки. Енергії молекулярних орбіталей. Міцність та кратність зв'язку. Порядки зв'язків та індекси вільної валентності. Багатоатомні молекули. $\sigma$ - та $\pi$ -орбіталі. Залежність властивостей молекули від основних характеристик зв'язку. Література: [1, с. 138-150; 157-171, 2, с. 168-187, допоміжна 4 с.135-139].
7.	18.10.2021	<b>Тема 2.6. Поняття про симетрію.</b> Елементи симетрії. Операції симетрії. Таблиці характерів. Література: [1, с. 150-173; 194-196, 2, с. 168-187, допоміжна 4 с.135-139].
8.	25.10.2021	<b>Розділ 3. ЕЛЕКТРОННА БУДОВА ТА ВЛАСТИВОСТІ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК</b> <b>Тема 3.1. Основні поняття. Будова, ізомерія, номенклатура.</b> Вступ. Основні поняття координаційної хімії: центральний атом, ліганд, внутрішня та зовнішня сфери, координаційне число та ступінь окиснення, центрального атома, координаційна формула. Історія відкриття комплексних сполук. Деякі особливості f- та d-орбіталей. Координаційні числа і симетрія. Типи лігандів. Ізомерія. Будова координаційного поліедру. Елементи номенклатури. Література: [1, с. 200-203; 2, с. 200-207, допоміжна 4 с.153-175, 7 с.9-26, 37-48].

9.	01.11.2021	<b>Тема 3.2. Хімічний зв'язок в координаційних сполуках</b> Теорія хімічного зв'язку в комплексах. Координаційна теорія Вернера. Ефективний атомний номер. Електростатична теорія Косселя. Поляризаційна теорія. Теорія жорстких і м'яких кислот та основ Пірсона. Теорія валентних зв'язків.
10.	08.11.2021	Теорія кристалічного поля. Теорія поля лігандів. Кількість d-електронів. Слабкі та сильні поля.
11.	15.11.2021	Фізико-хімічні властивості сполук з позиції теорії кристалічного поля. Хелатний та макроциклічний ефекти. Октаедричні, плоско квадратні та тетраедричні комплекси. Ліганди слабого та сильного поля. Ряд Ірвінга-Вільямса. Теорія поля лігандів. Метод валентних зв'язків. Магнітні властивості. Типи $\pi$ -зв'язування в комплексних сполуках. Обмін лігандами. Стійкість координаційних сполук в розчині.
12.	22.11.2021	<b>Тема 3.3</b> Основні типи комплексів. Ацидокомплекси. Гідроксидні, оксидні та халькогенідні комплекси. Карбонільні, нітрозильні, ціанідні комплекси. Солі Крөггманна. Комплекси з лігандами, що координовані за рахунок $\sigma$ -зв'язку.
13.	29.11.2021	<b>Тема 3.4.</b> Основні методи синтезу комплексів. Темплатний синтез. Механізми реакцій заміщення лігандів. Транс- та цис-ефекти.
14.	06.12.2021	<b>Тема 3.5.</b> Дослідження координаційних сполук методом ІЧ-спектроскопії
15.	13.12.2021	<b>Тема 3.6.</b> Метод електронної спектроскопії поглинання, встановлення будови координаційного поліедру.
16.	20.12.2021	<b>Тема 3.7.</b> Диференціальний термічний аналіз, як спосіб встановлення гідратного складу комплексів.
17.	27.12.2021	<b>Тема 3.8.</b> Метод ЕПР спектроскопії для дослідження будови координаційних сполук.
18.		<b>Тема 3.9</b> Застосування координаційних сполук

#### Практичні заняття

Мета практичних занять полягає у закріпленні теоретичних знань та набутті навичок інтерпретації одержаних експериментально результатів. Всі практичні заняття носять характер дискусії, що дозволяє студенту не лише проявити себе, але й навчитись критично мислити та аналізувати, інтерпретувати власні результати. Тому кожен студент на кожному практичному занятті виступає, як в ролі доповідача так і в ролі опонента

№	Дата	Опис заняття
1	10.09.2021	Основні типи хімічного зв'язку. Хімічний зв'язок в сучасній науці.
2	24.09.2021	Знання теорії хімічного зв'язку, як базис при створенні сполук заданого складу з заданими властивостями.
3	08.10.2021	Зміна параметрів зв'язку в рядах d- та f-елементів.
4	22.10.2021	Залежність властивостей сполук від природи зв'язку в молекулі.
5	05.11.2021	Теоретичні методи дослідження просторової будови комплексів. Ізомерія комплексів: геометрична ізомерія, структурна ізомерія, координаційна ізомерія, координаційна полімерія, сольватна ізомерія, іонізаційна ізомерія, сольова ізомерія, валентна ізомерія, конформаційна та спінова ізомерія.
6	19.11.2021	Метод валентних зв'язків. Теорія кристалічного поля. Задачі по магнітним та оптичним властивостям залежно від типу лігандів, ЦА та координаційного поліедру. Розщеплення d-підрівня в полях

		<i>різної симетрії. Теорема Яна–Телера.</i>
7	03.12.2021	<i>Синтез координаційних сполук.</i>
8	17.12.2021	<i>Дослідження синтезованих комплексів методами УФ-, ІЧ-спектроскопії та кондуктометрії. Електронні спектри комплексів.</i>
9	31.12.2021	<i>Підсумкове заняття</i>

### 6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, підготовка до практичних занять, підготовка, виконання та здача ргр, підготовку до мкр, підготовка до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС	Кількість годин на підготовку
<i>Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, опрацювання тем винесених на самостійне опрацювання</i>	<i>2 години на тиждень (36 год)</i>
<i>Виконання РГР</i>	<i>10 годин</i>
<i>Підготовка до МКР (повторення матеріалу)</i>	<i>10 годин</i>
<i>Підготовка до заліку</i>	<i>10 годин</i>

Теми винесені на самостійне опрацювання:

№ з/п	Назва теми, що виноситься на самостійне опрацювання	Кількість годин СРС
1	<b>Розділ 1. ВСТУП ДО ТЕОРІЇ ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ.</b> Теорія багатоелектронних атомів. Енергетичні рівні в атомах. Спін-орбітальна взаємодія. Рівняння Шредінгера для атома водню. Квантування обертового руху. Метод самоузгодженого поля. Література: [1, с. 18-22; 22-24; 44-46, 3].	6
2	<b>Розділ 2. ДВОХАТОМНІ МОЛЕКУЛИ. ПРИРОДА ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ</b> Векторна модель атома. Хвильові функції багатоелектронних атомів. Проста іонна модель галогенідів. Інші види електростатичних взаємодій. Молекули з насиченими та ненасиченими зв'язками, ароматичні сполуки. Енергії молекулярних орбіталей. $\sigma$ - та $\pi$ -орбіталі. Ковалентний зв'язок у молекулі водню. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО). Література: [1, с. 89-94; 104-114; 127-131; 136-150; 176-186; 194-200; , 3].	6
3	Метод валентних зв'язків. Октаедричні, плоско квадратні та тетраедричні комплекси. Типи $\pi$ -зв'язування в комплексних сполуках. Література: [1, с. 214-216; 2, с.188-197, 203-210, допоміжна 5,7].	4
4	Методи магнетохімії в хімії комплексів. Розрахунки спінової рівноваги та магнетичного внеску в термодинамічні функції – ізобарно-термічний потенціал, ентальпія та ентропія перетворення високоспінового комплексу на низькоспіновий.	5
5.	Супрамолекулярні координаційні сполуки. Сполуки з нульовим і негативним ступенями окиснення ЦА. Координаційні сполуки на поверхні твердого тіла	5
6.	Реакції та методи синтезу координаційних сполук. Правила перетворення	5



	<i>координаційних сполук. Допуск до лабораторної роботи, домашня письмова робота.</i>	
7	<i>Методи дослідження будови координаційних сполук: УФ-, ІЧ-спектроскопія та кондуктометрія. Інтерпретація електронних спектрів: діаграми Танабе – Сугано.</i>	5

## 7. Політика та контроль

### Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції, практичних та лабораторних занять проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу Zoom або Google meet. Відвідування занять он-лайн режимі є обов'язковим.

#### Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. Несвоєчасне виконання лабораторної роботи без поважної причини штрафуються 1 балом;
2. Несвоєчасний захист роботи без поважної причини штрафуються 1 балом;
3. За кожний тиждень запізнення з поданням домашньої контрольної роботи на перевірку нараховується 1 штрафний бал (але не більше 5 балів).
4. За наукову новизну внесена до дкр нараховується від 5 до 10 заохочувальних балів;
5. За активну роботу на лекції нараховується до 1 заохочувального балу (але не більше 10 балів на семестр).
6. За активну участь та підготовку до практичного заняття студент отримує від 5 до 10 балів.

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

### 8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: опитування на практичному заняттях, МКР, виконання та захист РГР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: письмовий залік.

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 50 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- Практичні заняття (підготовка мінімум однієї доповіді на запроповану тему);
- написання модульної контрольної роботи (МКР);
- виконання розрахунково графічної роботи (РГР).

#### 2. Критерії нарахування балів:

##### 2.1. Робота на практичному занятті:

- бездоганна робота – 10 балів;

– є певні недоліки у підготовці та розумінні завдань – 5-7 балів;  
Студент не готовий до заняття – 0 балів.

### 2.3. Модульний контроль.

Ваговий бал – **20 балів**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 9 – 8,1 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 8,0 – 6,8 балів;
- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 6,7 – 5,4 балів;
- незадовільна відповідь (не відповідає вимогам на «задовільно») – 0 балів.

### 2.4. Розрахунково-графічна робота.

Ваговий бал – **20 балів**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- творчо виконана робота, виконані всі вимоги до роботи – 12 – 10,8 балів;
- роботу виконано з незначними недоліками, виконані майже всі вимоги до роботи, або є несуттєві помилки – 10,7 – 9,6 балів;
- роботу не в повному обсязі, є недоліки щодо виконання вимог до роботи і певні помилки – 9,5 – 7,2 балів;
- роботу не зараховано (завдання не виконане) – 0 балів.

3. Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт (на час календарного контролю). На **першому календарному контролі** (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше  $0,5 \cdot 20^1 = 10$  балів. На **другому календарному контролі** (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше  $0,5 \cdot 60^2 = 30$  балів і зарахована домашня контрольна робота.

Сума вагових балів контрольних заходів протягом семестру складає:

$$R_c = 5 + 10 + 15 + 20 = 50 \text{ балів.}$$

Необхідною умовою допуску до **заліку** є захист лабораторної роботи, а також стартовий рейтинг ( $r_c$ ) не менше 30 балів.

Заліковий рейтинг складає  $R_E = 50$  балів

#### Критерії оцінювання залікової роботи.

Кожен студент одержує квиток, що складається з 15 питань двох рівнів складності та творчого завдання.

Відповідь на питання (або вирішення задачі) першого рівня складності становить рівня - 2 бали (всього 10 питань), другого - 4 бали (5 питань), індивідуальне творче завдання - 10 балів.

Оцінювання екзаменаційної роботи відбувається за шкалою:

«**відмінно**» 47-50 балів.

«**добре**» 38-46 балів.

«**задовільно**» 28-37 балів.

«**незадовільно**» 0-27 бали.

Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS та традиційних) його рейтингова оцінка  $R_D$  переводиться згідно з таблицею:

Рейтингова кількість балів $R_D$	Оцінка
95.....100	Відмінно
85.....94	Дуже добре
75.....84	Добре
65.....74	Задовільно
60.....64	Достатньо
$R_D < 60$	Незадовільно
Не виконані умови семестрової	Не допущено

<sup>1</sup> Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 8 тижнів.

<sup>2</sup> Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 14 тижнів.

Календарну атестацію проводить викладач за значеннями поточного рейтингу студентів на час атестації (8 тиждень та 14 тиждень). Якщо значення цього рейтингу не менше 50 % від максимально можливого на час атестації, студент вважається атестованим. В іншому випадку в атестаційній відомості виставляється «незадовільно».

**Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):**

**Складено** доцентами кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології:

к.х.н. доц. Бережницька О.С.

**Погоджено** Методичною комісією факультету (протокол №10 від 23 червня 2021 р.) )

**Ухвалено** кафедрою фізичної хімії (протокол № 13 від 30.06.2021 року)<sup>3</sup>

---

<sup>3</sup> Силабус спочатку погоджується метод. Комісією, а потім Ухвалюється кафедрою.