

Міністерство освіти і науки України
Карпатський національний університет імені Василя Стефаника

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Голова Приймальної комісії

Валентина ЯКУБІВ

«18» травня 2026 р.



ПРОГРАМА

вступного випробування з

Хімії

для зарахування на навчання за освітньо-науковим ступенем доктора філософії
за спеціальністю **ЕЗ Хімія**
на основі освітнього рівня магістра
(освітньо-кваліфікаційного ступеня спеціаліста)
при прийомі на навчання у 2026 році

Розглянуто та схвалено
на засіданні Приймальної комісії
Карпатського національного
університету імені Василя Стефаника
Протокол № 4 від 18 травня 2026 р.

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

Метою вступного випробування з дисципліни «Хімія» є перевірка рівня теоретичних знань і практичної підготовки вступників та відбір осіб для зарахування на навчання за освітньо-науковим ступенем доктора філософії за спеціальністю ЕЗ «Хімія» на основі освітнього ступеня магістра (освітньо-кваліфікаційного рівня спеціаліста) до Карпатського національного університету імені Василя Стефаника у 2026 році. Програма вступного випробування охоплює основні розділи хімії, зокрема фізичної хімії та хімії поверхні, а також містить перелік рекомендованої літератури для підготовки. Наведений перелік питань, що виносяться на вступне випробування, надає можливість вступникам систематизувати набуті знання та визначити ключові теми, на які слід звернути особливу увагу під час підготовки. Перелік рекомендованих джерел сприятиме ефективному добору навчальної та наукової літератури для підготовки до вступного випробування.

ОСНОВНІ ПИТАННЯ З ДИСЦИПЛІНИ

1. Хімія як фундаментальна наука: сучасне визначення предмета, рівні організації речовини та еволюція хімічних уявлень у контексті розвитку природничих наук.
2. Сучасні теоретичні підходи до опису будови речовини: квантово-механічний, статистико-термодинамічний та квантово-хімічний рівні опису.
3. Проблема «структура-властивість» у хімії: фундаментальні принципи встановлення взаємозв'язку між будовою речовини та її фізико-хімічними характеристиками.
4. Хімічний зв'язок як ключова концепція: еволюція уявлень (від класичних моделей до сучасних квантово-хімічних підходів) та межі застосування різних теорій.
5. Роль симетрії, інваріантності та принципів мінімуму енергії у формуванні структури атомів, молекул і твердих тіл.
6. Сучасні експериментальні методи дослідження в хімії: фізичні основи, інформативність і обмеження (спектроскопічні, дифракційні, мікроскопічні методи).
7. Обчислювальна хімія та матеріалознавство: методи *ab initio*, DFT, молекулярна динаміка; їх можливості та обмеження.
8. Поверхневі та міжфазні явища як міждисциплінарна проблема: роль поверхні у каталізі, наноматеріалах і сучасних технологіях.
9. Хімія в контексті глобальних викликів: нові матеріали, енергетика, екологія, сталий розвиток; роль хімічної науки у вирішенні цих проблем.
10. Електронні властивості поверхні. Механізми впливу поверхні на електронні властивості. Ефект поля. Квантові ями.
11. Хвильова теорія будови атома. Подвійна природа електрону. Принцип невизначеності Гейзенберга, рівняння Де-Бройля.
12. Основні поняття квантової механіки, які застосовуються для опису дво- та багатоатомних молекул: хвильова функція, стаціонарне рівняння Шредінгера, знак хвильової функції, позитивне та негативне перекривання, інтеграл перекривання, орбіталі типу гідрогенових, орбітальна апроксимація.
13. Розв'язання рівняння Шредінгера для одновимірного потенціального ящика. Поняття про тривимірний потенціальний ящик. Результати розв'язання рівняння Шредінгера для атома Гідрогену.

14. Поняття про електронну хмару. Радіальний розподіл ймовірності перебування електрона навколо ядра. Електронна густина. Хвильові функції атома Гідрогену та електронні орбіталі. Поняття про радіус атома.
15. Атомна орбіталь. Характеристика стану електрона квантовими числами. Головне квантове число. Енергетичний рівень. Орбітальне квантове число. Енергетичний підрівень (s-, p-, d-, f-підрівень). Виродження. Магнітне квантове число. Енергетична комірка. Вузлові поверхні та символи орбіталей.
16. Форми атомних орбіталей та їх орієнтація у просторі. Спінове квантове число. Спін електрона. Спін-орбітальна взаємодія. Спін-орбіталь. Сумарні орбітальний спіновий моменти електронів атома.
17. Будова багатоелектронних атомів. Розподіл електронів на енергетичних рівнях і підрівнях. Принцип мінімуму енергії. Принцип Паулі і ємність електронних рівнів та підрівнів. Проникнення та екранування.
18. Правило Гунда і послідовність заповнення атомних орбіталей електронами. Правило Клечковського (правило найменшого запасу енергії).
19. Способи зображення електронних структур атомів. Електронні терми і конфігурації. Електронні формули атомів у збудженому стані. Електронні формули йонів. Стабільні і нестабільні електронні конфігурації. «Магічні» числа.
20. Хімічний зв'язок і будова молекул. Суть хімічного зв'язку за Гайтлером і Лондоном. Причини утворення хімічного зв'язку. Природа хімічного зв'язку.
21. Основні типи хімічного зв'язку. Властивості взаємодіючих атомів: ефективний радіус, ефективний заряд, електронегативність, ступінь окиснення, валентність, координаційне число.
22. Ковалентний зв'язок, умови його утворення. Крива потенціальної енергії для молекули водню. Квантово-механічні методи трактування ковалентного зв'язку. Рівняння Шредінгера для молекул.
23. Валентність хімічних елементів. Поняття про спінову і координаційну валентність. Валентність з позицій методу валентних зв'язків (МВЗ). Постійна і змінна валентність. Валентність при високих температурах.
24. Метод валентних зв'язків, основні положення. Валентні можливості елементів. Обмінний та донорно-акцепторний механізми утворення ковалентного зв'язку (на прикладах йонів NH_4^+ , $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$).
25. Особливості ковалентного зв'язку: насичуваність і напрямленість. Переваги і недоліки методу валентних зв'язків.

26. Насичуваність ковалентного зв'язку. Модель, заснована на конфігурації інертних газів. Електрон-дефіцитні структури на прикладі молекули диборану. Льюїсові структури молекул. Резонансні структури. Кількісні характеристики хімічних зв'язків. Міцність зв'язку. Енергія зв'язку. Довжина зв'язку. Ступінь іонності зв'язку.
27. Кратність зв'язку. Способи перекривання електронних орбіталей. σ -, π - та δ - зв'язки. Одинарний і кратні зв'язки. Відносна стійкість π -зв'язків. Правило кратності зв'язку.
28. Полярність зв'язку. Хімічний зв'язок за МВЗ на прикладах молекул водню, фтору, азоту (неполярний зв'язок), гідроген хлориду (полярний зв'язок). Розбіжність МВЗ для молекули кисню з експериментальними даними. Дипольний момент хімічного зв'язку. Полярні і неполярні молекули. Дипольний момент молекул.
29. Напрявленість хімічних зв'язків. Концепція гібридизації атомних орбіталей. Особливості розподілу електронної густини гібридних орбіталей. Умови здійснення гібридизації. Прості типи гібридизації: sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d , sp^3d^2 (на прикладі атомів Берилію, Бору, Карбону, Нітрогену, Оксигену, Сульфуру, Хлору, Ксенону).
30. Гібридизація за участю неподілених електронних пар. Будова молекул берилій хлориду, бор трифториду, метану, води. Вплив гібридизації орбіталей на міцність зв'язку.
31. Стереохімія молекул. Валентні кути (кути між зв'язками). Просторова конфігурація молекул і йонів типу Ax , Ax_2 , Ax_3 , Ax_4 , Ax_5 , Ax_6 .
32. Основні положення теорії молекулярних орбіталей (МО). Молекулярні орбіталі як лінійна комбінація атомних орбіталей (МО ЛКАО). Класифікація МО: за типом атомних орбіталей, за характером зв'язку (зв'язуючі, незв'язуючі, розпушуючі), за симетрією електронної густини (σ - і π -МО).
33. Енергетичні діаграми молекул. Порядок заповнення (заселення) електронами молекулярних орбіталей. Визначення порядку (кратності) зв'язків.
34. Діаграми МО гомоядерних двоатомних молекул елементів другого періоду. Розподіл електронів на молекулярних орбіталах гомо- і гетероядерних молекул елементів другого періоду (LiH , HF , CO , NO).
35. Молекулярні орбіталі багатоатомних молекул (CH_4 , OF_2 , CO_2). Парамагнетизм.
36. Йонний зв'язок. Теорія Коссея. Умови утворення йонного зв'язку. Розподіл електронної густини в молекулі. Міра йонності зв'язку як функція різниці електронегативності атомів.

37. Ненапрявленість і ненасиченість йонного зв'язку. Розміри позитивно і негативно заряджених йонів. Координаційне число йону в кристалі. Основні типи кристалічних ґраток йонних сполук.
38. Основні положення концепції поляризації йонів. Поляризуюча дія і здатність до поляризації йонів; чинники, які впливають на них. Обмеженість концепції поляризації йонів.
39. Теорія поляризації. Вплив поляризації на ступінь ковалентности хімічного зв'язку. Пояснення закономірностей в зміні фізичних властивостей сполук (термічна стійкість, розчинність в полярних та неполярних розчинниках, забарвлення) з точки зору теорії поляризації.
40. Водневий зв'язок, природа і особливості водневого зв'язку. Напрявленість водневого зв'язку. Енергія і довжина водневого зв'язку.
41. Види водневого зв'язку: міжмолекулярний і внутрішньомолекулярний. Вплив водневого зв'язку на властивості речовин. Водневий зв'язок між молекулами гідрогенфлуориду, води, амоніаку. Утворення надмолекулярних структур за участю водневих зв'язків. Водневий зв'язок в білках.
42. Металічний зв'язок. Металічний стан і його особливості. Зонна теорія твердого тіла. Утворення енергетичних зон при перекриванні орбіталей, їх типи і характер заповнення. Зона провідності, заборонена зона, валентна зона. Електрони і дірки.
43. Типи твердих тіл з позиції зонної теорії: метали, напівпровідники (n- і p-напівпровідники), ізолятори (діелектрики). Власна і домішкова провідність. Межі застосування зонної теорії.
44. Електрони в металах. Модель вільних електронів - теорія Зоммерфельда. Основні поняття зонної теорії твердих тіл. Металічна провідність. Ізолятори. Напівпровідники. Електронна та діркова провідність.
45. Кінетичні явища в напівпровідниках. Елементарні збудження в твердих тілах: магнони, полярони, екситони, плазмони та інші. Квантовий ефект Холла.
46. Міжмолекулярна взаємодія. Сили Ван-дер-Ваальса. Орієнтаційна, індукційна і дисперсійна взаємодія. Чинники, які визначають енергію міжмолекулярної взаємодії: величина дипольного моменту молекул, здатність молекул до поляризації, розміри молекул. Ненасиченість та ненапрявленість ван-дер-ваальсового зв'язку. Вплив вандерваальсових взаємодій на властивості речовин.
47. Кристалічний стан речовини. Будова кристалів. Основні властивості кристалів: анізотропія властивостей, однорідність, здатність до самоогранення, симетрія.

48. Елементи та операції симетрії. Симетрія зовнішніх форм кристалів.
49. Внутрішня будова кристалів. Принцип найщільнішої упаковки. Гексагональна та кубічна найщільніші упаковки. Пустоти у щільних упаковках: октаедричні та тетраедричні.
50. Координаційне число та координаційний багатогранник. Стереохімічні особливості для різних координаційних чисел.
51. Кристалічні ґратки. Елементарна комірка. Кристалографічні класи і системи. Типи кристалічних ґраток: йонні, атомні, молекулярні, металічні. Кристалічні структури. Ізоморфізм і поліморфізм.
52. Тверді розчини вкорінення та тверді розчини заміщення. Аддукти, клатрати, тектогідрати. Типи кристалів.
53. Гомодесмічні та гетеродесмічні системи. Острівні, ланцюгові, шаруваті і каркасні структури. Фізичні властивості кристалів.
54. Будова реальних кристалів. Дефекти кристалічних ґраток. Теплові коливання атомів.
55. Типи дефектів: точкові, дислокації та поверхневі дефекти. Дефекти та надструктури. Вакансії та атоми вкорінення. Дефекти за Шоткі. Дефекти за Френкелем. Енергія утворення дефектів. Атоми заміщення. Електронні дефекти.
56. Лінійні дефекти. Дислокації. Поверхневі дефекти. Нестехіометрія. Ферум (II) оксид як типовий представник нестехіометричних сполук. Тверді розчини та нестехіометричні фази.
57. Структурні елементи поверхні кристалів: молекулярно-гладенькі та молекулярно-шериховаті грані, ступені росту, вершини та ребра кристалів.
58. Структура приповерхневої зони кристалу, міжатомні відстані та особливості орієнтації молекул поблизу поверхні. Поверхневі ґратки.
59. Випромінювання та поглинання світла атомами та молекулами. Спектри поглинання двоатомних молекул. Електронні, коливальні та обертальні складові рівнів енергії.
60. Методи квантової механіки в теорії поверхні. Моделі слабкозв'язаного електрона та сильного зв'язку в теорії поверхні. Модель желе. Одномірна зонна теорія.
61. Поверхневі стани. Поверхнева зона Бриллюена. Положення рівня Фермі в об'ємі та на поверхні твердих тіл.
62. Поверхня рідини та аморфних тіл. Функції радіального розподілу атомів поблизу поверхні.
63. Електронні явища на поверхні. Робота виходу електрона з металу. Фотоефект. Рівняння Ейнштейна. Термоелектронна емісія, формула

- Річардсона-Дешмена. Контактна різниця потенціалів, її зв'язок з роботою виходу. Ефект Шотткі. Вплив адсорбованих шарів на роботу виходу.
64. Методи аналізу поверхні та їх застосування. Класифікація методів аналізу поверхні. Теплова дія, емісія нейтральних атомів. Зондування: електронами, іонами, фотонами, нейтральними частинками. Вплив: електричного та магнітного поля, поверхневих хвиль.
 65. Метод Х-променевої фотоелектронної спектроскопії. Основні принципи методу. Хімічні зсуви. Апаратура. Особливості експерименту. Застосування.
 66. Електронна оже-спектроскопія. Фізичні основи. Експериментальні методи. Кількісний аналіз. Практичні застосування.
 67. Атомно-силова та тунельна мікроскопія. Принципи, на яких основані атомно-силова та тунельна мікроскопія. Умови застосування методів. Області практичних застосувань.
 68. Адсорбція. Фізична та хімічна адсорбція. Кінетика адсорбції на однорідній та неоднорідній поверхні. Рівняння Еловича. Адсорбційна формула Гіббса.
 69. Моделі адсорбції Ленгмюра, Фрейндліха, Фрумкіна-Фаулера, Брунауера-Еммета-Теллера. Статистико-термодинамічне трактування рівноважної адсорбції.
 70. Ізотерма адсорбції. Природа адсорбційних сил. Центри адсорбції.
 71. Розрахунок енергії взаємодії адсорбованих атомів з поверхнею. Проходження молекул через капіляр при адсорбції. Найпростіша форма ізотерми адсорбції. Адсорбція з розчинів. Ізобара адсорбції. Теплота адсорбції.
 72. Хемосорбція. Поверхневий хімічний зв'язок. Модель резонансного рівня. Поверхневі кластери. Особливості хемосорбції в напівпровідниках та металах.
 73. Одержання твердих тіл із заданими поверхневими властивостями. Монокристалічні матеріали. Вирощування монокристів і напівпровідникових тонких плівок з газової фази, розплаву та розчину. Твердофазний синтез.
 74. Дисперсні матеріали. Синтез високодисперсних матеріалів методом конденсації. Ультрадисперсні матеріали та особливості їх фізико-хімічних властивостей.
 75. Основи одержання сорбентів з заданою питомою поверхнею та каталізаторів із заданим рельєфом поверхні.
 76. Технологія одержання дисперсних оксидів кремнію, заліза, титану та алюмінію.
 77. Методи вирощування і фізико-хімічні властивості тонких плівок.

ПЕРЕЛІК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Неділько С.А., Попель П.П. Загальна і неорганічна хімія. – Київ: Либідь, 2001.
2. Яцимирський В.К. Фізична хімія: підруч. для вищ. навч. закл. / Віталій Яцимирський. - К. ; Ірпінь : Перун, 2010. - 512 с. : рис., табл. - Бібліогр.: с. 5. - ISBN 978-966-569-224-9
3. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. — 872 с.: 78 іл. ISBN 978-966-613-921-7. <http://ktf.lnu.edu.ua/books/QM4/QM4.pdf>
4. Роїк О.С., Усенко Н.І. Фізична хімія. Термодинаміка та електрохімія. – 2022, 308 с. <https://physchem.knu.ua/posibniki/Roik-Usenko-zadachnyk-NEW.pdf>
5. Housecroft C.E., Sharpe A.G. Inorganic Chemistry (fifth edition) // Pearson. –United Kingdom. - 2018.- 1251 p.
6. Weller M., Overton T., Rourke J., Armstrong F. Inorganic Chemistry (6th edition)/ Oxford University Press. – United Kingdom. - 2014.- 875 p.
7. Atkins P., de Paula J. Atkins' Physical Chemistry. 11th edition. Oxford: Oxford University Press, 2018. — 1264 p.

КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ

Порядок проведення та критерії оцінювання вступних випробувань регулюються Положенням про організацію вступних випробувань у Карпатському національному університеті імені Василя Стефаника.