

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана

з навчальної роботи

Наталія Усенко Наталія УСЕНКО

« 30 » 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СПЕКТРОСКОПІЯ ОБ'ЄКТІВ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА
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	6
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: професор, Амірханов В.М., асистент, Струтинська Н.Ю.

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

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

КИЇВ - 2022

Розробники: Амірханов Володимир Михайлович, д.х.н., професор, професор кафедри неорганічної хімії.

Струтинська Наталія Юріївна, д.х.н., асистент кафедри неорганічної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО


В. о. зав. кафедри неорганічної хімії

 Ростислав ЛАМПЕКА

Протокол № 11 від «_11_» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету.

Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« 30 » червня 2022 року

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами теоретичних основ методів інфрачервоної та електронної спектроскопії, одержання практичних навичок по інтерпретації результатів спектральних досліджень сполук, що є об'єктами навколишнього середовища, отримання зі спектральних даних інформації щодо ідентифікації цих хімічних речовин.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Даний курс базується на знаннях з таких навчальних предметів, як „Неорганічна хімія”, „Хімія координаційних сполук”, „Квантова хімія”, окремих розділів фізики і математики. У свою чергу, вона необхідна для виконання кваліфікаційних робіт на звання бакалавра та магістра.

3. Анотація навчальної дисципліни

Спектральні методи дослідження відіграли визначну роль у вивченні будови хімічних речовин, і на сьогодні вони продовжують залишатись найпоширенішими методами їх дослідження. Цьому сприяє поява нової сучасної апаратури і комп'ютерних методів обробки спектрів, що значно розширює можливості спектральних методів.

Програма курсу “Спектроскопія об'єктів навколишнього середовища” включає: взаємодію речовини з електромагнітним випромінюванням, природу коливальних спектрів, коливальні спектри деяких багатоатомних неорганічних молекул та іонів, характеристичні коливання, ІЧ та електронні спектри координаційних сполук із неорганічними і органічними лігандами, природу електронних спектрів, електронні спектри іонів *d*- та *f*- металів та їх координаційних сполук із неорганічними і органічними лігандами.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформулювати загальні уявлення про взаємодію речовин з електромагнітним випромінюванням, про види молекулярної спектроскопії і основні фактори, що обумовлюють форму, ширину та інтенсивність спектральних ліній
- навчити студентів проводити інтерпретацію коливальних спектрів неорганічних сполук за допомогою теорії груп і робити висновки про їх будову;
- надати частотні інтервали основних характеристичних коливань і проаналізувати фактори, які впливають на значення характеристичних частот;
- надати принципи віднесення електронних спектрів координаційних сполук із застосуванням діаграм Оргела та Танабе-Сугано.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна «Спектроскопія об'єктів навколишнього середовища» спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК2, ЗК5 та СК1, СК3, СК4, СК8, СК9.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форма (та/або методи і технології) викладання і навчання)	Методи оцінювання* та порогів критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результати навчання			
1.1	Знати та розуміти основні закони взаємодії речовин з електромагнітним випромінюванням; правила відбору для коливальних і електронних спектрів, фактори, які впливають на інтенсивність і ширину спектральних ліній.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
1.2	Знати основні принципи і поняття методів електронної, люмінесцентної, КР та ІЧ спектроскопії.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
1.3	Знати поняття терму, його позначення, розщеплення термів газоподібних іонів внаслідок взаємодії з лігандним оточенням.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
1.4	Знати як викривлення симетрії оточення впливає на енергетичні рівні <i>d</i> -орбіталей та як це відображається в електронних спектрах.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
2.1	Використовувати концепцію характеристичних коливань для аналізу ІЧ спектрів.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
2.2	Робити висновки про характер координації найбільш поширених типів неорганічних і органічних лігандів.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
2.3	Робити віднесення електронних спектрів координаційних сполук із застосуванням діаграм Оргела та Танабе-Сугано.	Лабораторний практикум	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10
2.4	Застосовувати електронну спектроскопію для встановлення геометричної будови координаційних сполук.	Лабораторний практикум	<i>ПТК, ОЛДР, ПІ</i>	10

3.1	Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	Лекції, лабораторний практикум	ПТК, ОЛДР, ПІ	7
4.1	Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.	Лекції, лабораторний практикум	ПТК, ОЛДР, ПІ	7
4.2	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	ПТК, ОЛДР, ПІ	6

* групові письмові тематичні контрольні роботи (ПТК)
 обов'язкові домашні (самостійні) роботи (ОЛДР)
 письмовий іспит (ПІ)

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання.

Результати навчання дисципліни(код)	1	1	1	1	2	2	2	2	3	4	4
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	1	2
Програмні результати навчання (назва)											
P04. Розуміти основні закономірності та типи хімічних реакцій та їх характеристики.	+		+			+		+			
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.		+		+	+		+				
P08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади..		+		+	+		+		+	+	
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.									+	+	+
P20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.					+		+	+	+		
P21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+			+					+	+	+

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; 2.1 – **10/6 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.2; 2.2– **10/6 балів**.
3. Контрольна робота №3: РН 1.3, 2.3 – **10/6 балів**.
4. Контрольна робота №4: РН 1.4, 2.4 – **10/6 балів**.
5. Лабораторні роботи та домашні роботи: РН 1.2, 1.4, 3.1, 4.1 – **20/12 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, 1.2, 1.3, 1.4, 2.2, 2.4.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 2 теоретичних питань - 20 балів, 2 практичних питань - 20 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** та виконав і вчасно здав всі лабораторні роботи.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **5 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **9 тижня** семестру;

Контрольна робота №3: не раніше **13 тижня** семестру;

Контрольна робота №4: не раніше **16 тижня** семестру;

Лабораторні роботи № 1,2 виконується до **8 тижня** семестру;

Лабораторна робота № 3,4 виконується впродовж **9–15 тижня** семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН**

№	Назва	Кількість годин		
		Лекції	Лабораторні роботи	Самостійна робота
<i>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I "Коливальні спектри неорганічних сполук"</i>				
1	Загальний вступ у спектроскопію. Природа коливальних спектрів. ІЧ і КР спектри.	2		6
2	Коливання багатоатомних молекул.	2		6
	Лабораторна робота № 1		8	
3	Аналіз форми нормальних коливань за допомогою теорії груп ІЧ спектри неорганічних молекул та іонів (T_d , O_h , D_{4h} , D_{3h} , C_{3v} і C_{2v} симетрії).	3		6
	Поточна контрольна 1: „Вступ у спектроскопію”			
<i>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II " Коливальні спектри координаційних сполук "</i>				
4	Коливальні спектри комплексів з неорганічними лігандами: з діоксигеном, ціанід-тіоціанат, аква- і гідроксо-, нітро- і нітрито-лігандами, амінокомплекси.	2		6
5	Характеристичні коливання. Фактори, які впливають на значення характеристичних частот.	3		6
	Лабораторна робота № 2		7	
6	Кореляційні таблиці. Характеристика окремих областей ІЧ спектрів. Коливальні спектри комплексів з органічними лігандами.	3		6
	Поточна контрольна 2: „Коливальні спектри координаційних сполук”			

ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III "Атомні електронні спектри"				
7	Електронні переходи в атомах і молекулах. Спектри іонів перехідних металів. Терм, його позначення. Правила відбору. Інтенсивність електронних переходів та ширина смуг поглинання.	2		6
	Лабораторна робота № 3		8	
8	Спін-орбітальна взаємодія в ізольованих іонах перехідних металів. Схема Рассела-Саундерса та j-j-схема.	3		6
	Поточна контрольна 3: „Атомні електронні спектри”			
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ IV "Електронні переходи в атомах координаційних сполук"				
9	Теорія кристалічного поля та теорія поля лігандів. Вплив викривлення симетрії оточення на енергетичні рівні d-орбіталей. Ефект Яна-Теллера та його вплив на електронні спектри.	3		6
	Лабораторна робота № 4		7	
10	Застосування електронної спектроскопії для встановлення геометричної будови координаційних сполук.	3		6
11	Слабкі та сильні поля. Високоспінові і низькоспінові комплекси. Одноелектронні багатоелектронні системи. Діаграми Оргела та Танабе-Сугано.	4		
	Поточна контрольна 4: „Електронні спектри координаційних сполук”			

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій –**30 год.**

Лабораторні заняття - **30 год**

Самостійна робота - **60 год.**

9. Рекомендовані джерела.

Основні:

1. Зуб В. Я., Амірханов В. М. Інфрачервона та електронна спектроскопія неорганічних і координаційних сполук: навчальний посібник. – К.:Видавничо-поліграфічний центр Київський університет, 2012.
2. Lever A.B.P. Inorganic Electronic Spectroscopy. Elsevier, Amsterdam. 1968.
3. Nakamoto K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds – Hoboken, New Jersey, John Wiley & Sons, Inc. 2009.
4. Larkin P. J. Infrared and raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Elsevier, 2011. 230 p.
5. Stuart B. H. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. Wiley, 2004. 242 p.

Додаткові:

1. Drago R. S. Physical methods for chemists. Surfside, 1992 (second edition).
2. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. «Вища школа». 1975.
3. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J. Spectrometric identification of organic compounds John Wiley&Sons, Inc. 2005.