

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»



Заступник декана

навчальної роботи

Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СПЕКТРОСКОПІЯ НЕОРГАНІЧНИХ СПОЛУК
для здобувачів освіти**

галузь знань

10 Природничі науки

спеціальність

102 Хімія

освітній рівень

бакалавр

освітня програма

Хімія

вид дисципліни

вибіркові

Форма навчання

денна

Навчальний рік

2022/2023

Семестр

6

Кількість кредитів ECTS

4

Мова викладання, навчання

та оцінювання

українська

Форма заключного контролю

іспит

Викладачі: проф. Амірханов В.М., асист. Струтинська Н.В..

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

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

КИЇВ – 2022

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

ЗАТВЕРДЖЕНО

В.о. завідувача 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, отримання зі спектральних даних інформації щодо будови хімічних речовин, способів координації лігандів у неорганічних і координаційних сполуках та природи зв'язку метал – ліганд.

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 є базовою для вивчення таких спеціальних дисциплін як «Люмінофорні сполуки та матеріали», «Люмінесцентні явища в хімії», а також 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 неорганічних сполук» складається з декількох розділів. Вступний розділ присвячений матеріалу щодо основних питань взаємодії речовин з електромагнітним випромінюванням в області коливальних та електронних переходів. Наводяться принципи методів інфрачервоної та електронної спектроскопії, комбінаційного розсіювання світла, люмінесценції та збудження люмінесценції. У подальших розділах студенти знайомляться з основними підходами до інтерпретації коливальних і електронних спектрів і навчаються робити висновки про будову речовин на основі спектральних даних.

Засвоєння даного матеріалу необхідно для наступного вивчення фактичного матеріалу з курсів „Координаційна хімія перехідних металів”, „Магнетохімія”, „Основи нанохімії”, а також для виконання кваліфікаційних робіт на звання бакалавра і магістра.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформувані 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;
- дати частотні інтервали основних характеристичних коливань і проаналізувати фактори, які впливають на значення характеристичних частот;
- сформулювати основні спектральні критерії, які дозволяють визначати характер координації неорганічних і органічних лігандів у координаційних сполуках;
- дати принципи віднесення електронних спектрів координаційних сполук із застосуванням діаграм Оргела та Танабе-Сугано;
- обговорити застосування нефелоуксетичного зсуву як критерія міри ковалентності зв'язку метал - ліганд;
- розглянути електронні спектри комплексів лантаноїдів та питання дослідження будови координаційних сполук лантаноїдів в твердому стані та в розчинах.

Навчальна дисципліна «Спектроскопія неорганічних сполук» спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК3, ЗК5, ЗК10 та СК1, СК3, СК4, СК8.

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	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	Визначати форму і активність нормальних коливань за допомогою теорії груп.	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

* 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**.
2. Контрольна робота №3: РН 1.3, 2.3 – **10/6 балів**.
2. Контрольна робота №4: РН 1.4, 2.4 – **10/6 балів**.
3. 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
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I "Коливальні спектри неорганічних сполук"				
1	Загальний вступ у спектроскопію. Природа коливальних спектрів. ІЧ і КР спектри.	2		6
2	Коливання багатоатомних молекул.	2		6
	Лабораторна робота № 1		7	
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
	Контрольна №1: „Вступ у спектроскопію ”			
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II " Коливальні спектри координаційних сполук "				
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.	2		6
	Лабораторна робота № 2		6	
6	Кореляційні таблиці. Характеристика окремих областей ІЧ спектрів. Коливальні спектри комплексів з органічними лігандами.	3		6
	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		7	
8	Спін-орбітальна взаємодія в ізольованих іонах перехідних металів. Схема Рассела-Саундерса та j-j-схема.	3		6
	ПТКЗ: „ 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	2		6

	d-орбіталей. Ефект Яна-Теллера та його вплив на електронні спектри.			
	Лабораторна робота № 4		6	
10	Застосування електронної спектроскопії для встановлення геометричної будови координаційних сполук.	3		6
11	Слабкі та сильні поля. Високоспінові и низькоспінові комплекси. Одноелектронні багатоелектронні системи. Діаграми Оргела та Танабе-Сугано.	4		6
	ПТК4: „Електронні спектри координаційних сполук”			

*ПТК - поточна тематична контрольна

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

Лекцій –**28 год.**

Лабораторні заняття - **26 год.**

Самостійна робота - **66 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. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J. Spectrometric identification of organic compounds John Wiley&Sons, Inc. 2005.