

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана  
з навчальної роботи



*М. Усенко*  
Наталія УСЕНКО  
30 » 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
СУЧАСНІ ФІЗИЧНІ МЕТОДИ В КАТАЛІЗІ**

для здобувачів освіти

галузь знань	<b>10 Природничі науки</b>
спеціальність	<b>102 Хімія</b>
освітній рівень	<b>бакалавр</b>
освітня програма	<b>Хімія</b>
вид дисципліни	<b>вибіркова, з блоку вибору «Фізична хімія»</b>

Форма навчання	<b>денна</b>
Навчальний рік	<b>2022/2023</b>
Семестр	<b>5</b>
Кількість кредитів ECTS	<b>3</b>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>українська</b>
Форма заключного контролю	<b>іспит</b>

Викладач: доцент Гайдай Сніжана Вікторівна

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.  
на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2022**

Розробник: Гайдай Сніжана Вікторівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від « 02 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 29 » червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 року

- 1. Мета дисципліни** – формування у студентів теоретичних основ сучасних фізико-хімічних методів: мас-спектрометрії, рентгено-фотоелектронної спектроскопії та Мессбауерівської спектроскопії та отримання практичних навичок їх використання.
- 2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни** – володіти базовими знаннями університетських курсів вищої математики (інтегрування, диференціювання), знати основи фізики та хімії.
- 3. Анотація навчальної дисципліни.** В рамках курсу «Сучасні фізичні методи в каталізі» вивчаються основні принципи методів, що широко використовуються для опису явищ в гетерогенному каталізі: Мас-спектрометрії, термодесорбції, рентген-фотоелектронної спектроскопії, Мессбауерівської спектроскопії. Розуміння зв'язку між результатами, отриманими фізико-хімічними методами, і каталітичними властивостями, а також основних принципів проведення обробки експериментальних даних за допомогою програмного забезпечення є важливим етапом формування цілісної системи поглядів на взаємозв'язок будови речовини із її конкретними властивостями.
- 4. Завдання (навчальні цілі):** Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на формування здатності вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2); навичок використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК5); здатності до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (ЗК10); здатності застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1), здатності розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обгрунтовані рішення в області хімії (СК2); здатності здійснювати сучасні методи аналізу даних (СК5) та здатності здійснювати кількісні вимірювання (обчислення) фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (СК8).

#### 5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати місце фізичних методів дослідження в системі хімічних наук	лекції, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	5
1.2	Знати фізико-хімічні основи методів мас-спектрометрії, рентген-фотоелектронної спектроскопії та Мессбауерівської спектроскопії.	лекції, лабораторні, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	10
2.1	Уміти користуватися методами для дослідження стану поверхні каталізаторів різних процесів;	лекції, лабораторні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота, іспит	20
2.2	Уміти отримувати в повному обсязі інформацію з різних методів дослідження поверхні	лабораторні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота, іспит	20

<b>2.3</b>	Уміти аналізувати і обробляти інформацію, отриману з різних методів дослідження поверхні	лекції, лабораторні, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	20
<b>3.1</b>	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі гетерогенного каталізу	лекції, лабораторні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота, іспит	10
<b>3.2</b>	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та фахове спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	лекції, лабораторні, самостійні	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота	5
<b>4.1</b>	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворювати результати експерименту	лабораторні, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання),	5
<b>4.2</b>	Дотримуватися правил техніки безпеки	лабораторні, самостійні	усні опитування	5

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН	РНД (код)									
	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
P01. Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.		+	+							+
P02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.	+	+	+							
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	+	+	+					+	+	
P08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.							+	+	+	
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.			+	+	+	+	+	+	+	
P19. Використовувати свої знання, розуміння, компетенції та базові інженерно-технологічні навички на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.			+	+	+			+	+	
P20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.			+	+	+			+	+	

## 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, РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1 – 20/12 балів.**
2. Контрольна робота №2: **РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 3.2 – 20/12 балів.**
3. Виконання лабораторних робіт: **РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1, РН 3.2 – 10/6 балів**
4. Усні опитування: **РН 1.2, РН 2.3, РН 4.1, РН 4.2– 3/2 бали**
5. Оцінювання самостійної роботи: **РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1, РН 3.2 – 7/4 бали.**

#### 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, РН 1.2, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 3.1**

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: тестові питання (на 28 балів) і задачі (на 12 балів).

**Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою, ніж 24 бали.**

**Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він:**

набрав не менше, ніж **36 балів;**

виконав і здав лабораторні роботи

### 7.2. Організація оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 5 тижня семестру;

контрольна робота №2: не раніше 9 тижня семестру;

персональні завдання для виконання розрахункової самостійної роботи студенти отримують не пізніше, як за 5 тижнів до закінчення семестру;

оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Студенти мають право на одне перескладання кожної контрольної роботи у визначений викладачем термін.

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
<b>Відмінно</b> / Excellent	90–100
<b>Добре</b> / Good	75–89
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60–74
<b>Незадовільно</b> / Fail	0–59

**Структура навчальної дисципліни.  
Тематичний план лекцій і лабораторних занять  
5 СЕМЕСТР**

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	лаб. роб.	сам. робота
<i>Змістовий модуль 1 Метод мас-спектрометрії</i>				
1	Вступ. Тема 1 Випромінювання.	1		
2	Тема 2. Основні положення мас-спектрометрії	2		6
3	Тема 3. Види іонів, методи отримання.	2		6
4	Тема 4. Мас-спектрометр і його характеристики.	2		
5	Тема 5. Динамічні мас-спектрометри	1		
6	Тема 6. Адсорбція. Термодесорбція	2	4	6
7	Тема 7. Рівняння Поляні-Вігнера. Методи визначення $E_d$	2	4	6
8	Тема 8. Метод визначення $E_d$ за Цветановичем.	2		5
9	Тема 9. Основні підходи до інтерпретації мас-спектрів	2		
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	2		
<i>Змістовий модуль 2 Електронна спектроскопія для хімічного аналізу (ЕСХА) та гамма-резонансна (ГР) спектроскопія для фізико-хімічних досліджень.</i>				
10	Тема 10. Електронна спектроскопія для хімічного аналізу	2		5
11	Тема 11. Кількісний аналіз поверхні твердих тіл	2	2	6
12	Тема 12. Основні принципи Мессбауерівської спектроскопії	2		
13	Тема 13. Розрахунки і аналіз ГР-спектрів	2	4	6
	<i>Підсумкова модульна контрольна робота</i>	2		
	<b>УСЬОГО</b>	<b>28</b>	<b>14</b>	<b>48</b>

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – 28 год.

Лабораторних робіт – 14 год.

Консультації за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 4 тижні

Самостійна робота - 48 год.

## Рекомендована література:

### *Основна:*

1. Іщенко О.В., Гайдай С.В., Беда О.А. Мас-спектрометрія (підручник). – Київ: ВПЦ «Київський університет». – 2018 р. – 244 с.
2. Іщенко О.В., Дяченко А.Г., Гайдай С.В., Вакалюк А.В. Хімічна природа і структура гетерогенних каталізаторів. – Київ: ВПЦ «Київський університет», 2021. – 209 с.
3. Watson J. Th., Sparkman O. D. Introduction to Mass Spectrometry. Instrumentation, Application and Strategies for Data Interpretation. – John Wiley & Sons, 2007. – 819р.
4. Польшин Е.В., Васильєв М.О., Волошко С.М., Яценко Л.Ф. Месбаєурівська спектроскопія поверхневого шару титанового стопу ВТ6, модифікованого ультразвуковою ударною деформацією // Металофізика і новітні технології. –2013. –Т.36. – Випуск 3.
5. Щерба І.Д. Високоенергетична спектроскопія матеріалів. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2012. –248с.
6. Mössbauer effect: principles and applications. G.K. Wertheim – 2013. books.google.com

### *Додаткова:*

7. Загородній В.В. Локальні методи досліджень: підручник для студентів спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали». – КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані, 2019. – 323 с.
8. Опейда Й., Швайка О. Глосарій термінів з хімії. – Ін-т фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Донецький національний університет. – Донецьк: Вебер, 2008. – 738 с.



### *ПИТАННЯ НА ІСПИТ/ЗАЛІК*

Методи іонізації.  
Іонізація атомів та молекул.  
Види іонів при іонізації.  
Молекулярні іони.  
Уламкові іони.  
Іони, що перегруповуються.  
Метастабільні (дифузійні) іони.  
Від'ємні іони.  
Багатозарядні іони.  
Стабілізація заряду при іонізації.  
Основні аспекти при аналізі мас-спектрів. Ізотопний патерн.  
Термодесорбція і хроматографічний метод аналізу продуктів. Вимоги до кожного методу.  
Переваги і недоліки.  
Матеріальний баланс процесу термодесорбції.  
Фізична і хімічна адсорбція.  
Моделі процесів адсорбції і десорбції.  
Фізичний зміст передекспоненти в рівнянні Полянї-Вігнера.  
Статичні мас-спектрометри.  
Характеристики статичного мас-спектрометра.  
Омегатрон.  
Часопролітний мас-спектрометр.  
Квадрупольний мас-спектрометр.  
Однополярний квадрупольний мас-спектрометр.  
Метод обчислення  $E_d$ , який оснований на визначенні за однією точкою ( $T_m$ ).  
Метод обчислення  $E_d$ , який оснований на зміні швидкості нагріву зразка (I порядок).  
Метод обчислення  $E_d$ , який оснований на зміні швидкості нагріву зразка (II порядок).  
Метод Цветановича для десорбції першого порядку.  
Метод Цветановича для десорбції другого порядку.  
Енергія Фермі.  
Рівень вакууму.  
Робота виходу електрону.  
Фотоелектронна емісія з металів та напівпровідників.  
Оже-електрони.  
Обчислення енергії зв'язку з даних, які отримані з метода РФЕС.  
Інтенсивність рентгено-електронних ліній.  
Ізомерний зсув в методі РФЕС.  
Кількісний аналіз поверхні твердих тіл за методом РФЕС.  
Мессбауерівська спектроскопія. Умови резонансу.  
Випромінювання  $\gamma$ -квантів ядрами.  
Енергія віддачі.  
Ефект Доплера.  
Спіновий момент у ядер.  
Будова мессбауерівського спектрометра.  
Квадрупольна взаємодія. Надтонка взаємодія в ГР-спектрах.