



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

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

  
\_\_\_\_\_ Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 1 від « 31 » серпня 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 26 » жовтня 2021 року № 2

Голова науково-методичної комісії   
\_\_\_\_\_ Олександр ПОЇК

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 року

- 1. Мета дисципліни** – формування теоретичних основ сучасних резонансних фізико-хімічних методів: рентгено-фотоелектронної спектроскопії та Мессбауерівської спектроскопії, а також методу мас-спектрометрії і 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 «Резонансні методи дослідження» вивчаються основні принципи методів термодесорбції з використанням мас-спектрометра як детектора частинок, рентген-фотоелектронної спектроскопії, флуоресценції, Мессбауерівської спектроскопії; програмне забезпечення, яке використовується для обробки експериментальних даних. Особлива увага приділяється точності, можливостям і доступності кожного методу.
- 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 обґрунтовані 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
<b>1. Знання</b>				
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
<b>2. Вміння</b>				
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

2.3	Уміти аналізувати і обробляти інформацію, отриману з різних методів дослідження поверхні	лекції, лабораторні, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	20
<b>3. Комунікація</b>				
3.1	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
3.2	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. Автономність та відповідальність</b>				
4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту	лабораторні, самостійні	усні опитування, контрольна робота (тестові питання),	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки	лабораторні, самостійні	усні опитування	5

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

ПРН	РНД	РНД									
		1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
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 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 3.2 – 22/13 балів.**
2. Контрольна робота №2: **РН 1.1, РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1 – 18/11 балів.**
3. Виконання лабораторних робіт: **РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1, РН 3.2 – 10/6 балів**
5. Усні опитування: **РН 1.2, РН 2.3, РН 4.1, РН 4.2– 3/2 бали**
6. 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 30 балів) і задачі (на 10 балів).

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

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

набрав не менше, ніж **36 балів;**

написав дві модульні контрольні роботи, виконав і здав лабораторні роботи

### 7.2. Організація оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 6 тижня семестру;

контрольна робота №2: не раніше 10 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 / Excellent</b>	90–100
<b>Добре / Good</b>	75–89
<b>Задовільно / Satisfactory</b>	60–74
<b>Незадовільно / Fail</b>	0–59

#### Структура навчальної дисципліни.

#### Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№	Назва лекції	Кількість годин
---	--------------	-----------------

		лекції	лаб. роб.	сам. роб.
<b>Змістовий модуль 1. Електронна спектроскопія для хімічного аналізу та гамма-резонансна спектроскопія.</b>				
1	Тема 1. Електрони в твердих тілах.	2		
2	Тема 2. Зонна теорія твердих тіл. Зони Бріллюена. Ефективна маса електрона. Електропровідність металів.	3		6
3	Тема 3. Електронна спектроскопія для хімічного аналізу. Оже-електрони і рентгенівські кванти.	2		6
4	Тема 4. Обчислення енергії зв'язку з даних рентген-фотоелектронної спектроскопії (РФЕС). Хімічні зсуви в електронних спектрах. Кількісний аналіз поверхні твердих тіл. Обрахунок спектрів РФЕС.	2	2	
5	Тема 5. Основні принципи Мессбауерівської спектроскопії. Випромінювання $\gamma$ -квантів ядрами. Умови резонансу. Енергія віддачі. Ефект Доплера.	2		6
6	Тема 6. Надтонка взаємодія в гамма-резонансних спектрах. Обрахунок Мессбауерівських спектрів.	2	2	4
7	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	1		
<b>Змістовий модуль 2. Метод мас-спектрометрії</b>				
8	Тема 7. Випромінювання. Основні положення мас-спектрометрії	2		
9	Тема 8. Мас-спектрометр і його характеристики. Види мас-спектрометрів	2	4	6
10	Тема 9. Адсорбція. Термодесорбція	2		5
11	Тема 10. Рівняння Полянї-Вігнера. Методи визначення $E_d$	2		6
12	Тема 11. Метод визначення $E_d$ за Цветановичем	3	6	4
13	Тема 12. Аміачні каталізатори. Каталізатори окиснення СО	2		5
14	<i>Підсумкова модульна контрольна робота</i>	1		
	<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.**

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.