

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»



Заступник декана

з навчальної роботи

Наталія УСЕНКО

« 30 » 03 2021 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
МАГНЕТОХІМІЯ
для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	<u>3</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: доцент, Павленко В.О.

Пролонговано: на 2022/2023 н. р.  () « » 2022 р.

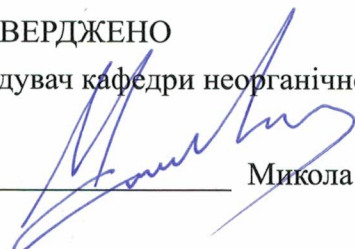
КИЇВ – 2021

Розробники:

Павленко Вадим Олександрович, д.х.н., доцент, доцент кафедри неорганічної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри неорганічної хімії


_____ Микола СЛОБОДЯНИК

Протокол № 9 від « 25 » лютого 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «11» березня 2021 року № 6

Голова науково-методичної комісії _____ Олександр РОЇК

« 11 » _____ березня 2021 року

1. Мета дисципліни – Курс "Магнетохімія" присвячений вивченню сучасних уявлень про зв'язок магнітних властивостей з електронною будовою сполук. Мета курсу - освоєння здобувачами освіти фундаментальних знань в області магнетохімії - науки, що перебуває на стику хімії й фізики твердого тіла, ознайомлення із сучасними напрямками й методами досліджень і вироблення навичок застосування цих знань.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

Курс "Магнетохімія" є спеціальним курсом підготовки магістрів спеціалізації "Неорганічна хімія". Для успішного освоєння викладеного матеріалу здобувачі освіти повинні мати підготовку з фізики, вищої математики, квантової хімії, хімії координаційних сполук, фізичних методів дослідження. Студенти повинні:

- мати уявлення про магнітні явища;
- знати теорію будови атомів та молекул, механізми утворення хімічного зв'язку, теорії кристалічного поля;
- уміти за складом речовини прогнозувати просторову будову координаційних центрів, та розщеплення електронних рівнів під дією кристалічного поля;
- уміти одержувати інформацію про структурні особливості координаційних і інших сполук на підставі аналізу даних фізичних методів дослідження;
- мати практичні навички по використанню сучасного устаткування

3. Анотація навчальної дисципліни

Предмет навчальної дисципліни «Магнетохімія» побудований таким чином, щоб дати здобувачам освіти уявлення про магнітні властивості речовин та їх взаємозв'язок з електронною та геометричною будовою центральних атомів координаційних сполук; методи дослідження магнітних властивостей хімічних речовин різних класів і у різних агрегатних станах; теоретичне прогнозування магнітних характеристик.

4. Завдання (навчальні цілі):

- дати уявлення про види магнітної поведінки речовини;
- схеми і принципи дії приладів для вимірювання магнітної сприйнятливості;
- навчити одержувати інформацію про електронну будову об'єкта на підставі аналізу його магнітних властивостей;
- навчити одержувати інформацію про структурні особливості координаційних і інших сполук на підставі аналізу їхніх магнітних властивостей;
- сформувані практичні навички для використання сучасного устаткування та теоретичних моделей.

Навчальна дисципліна «Магнетохімія» спрямована на досягнення наступних загальних і фахових компетентностей: ЗК1, ЗК2, ЗК3, ЗК4, ЗК7, ЗК14 та ФК2, ФК3, ФК4, ФК5, ФК6, ФК8.

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 сучасні теорії магнітної поведінки речовин та матеріалів,	Лекції, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	5
1.2	Знати основні види магнітної поведінки речовин, їх залежність від зовнішніх факторів та внутрішньої будови.	Лекції, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	9
1.4	Знати методи вимірювання магнітної сприйнятливості речовин та матеріалів.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7
1.5	Знати сучасні та класичні методи синтезу магнітних матеріалів	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7
1.6	Знати методи комп'ютерного моделювання магнітних параметрів речовини та обробки результатів магнетохімічного експерименту	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7
2.1	Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення якісних та кількісних задач незнайомої природи.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	9
2.2	Здійснювати систематизацію та критичний аналіз даних магнетохімічних досліджень.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7
2.3	Планувати, організувати та проводити лабораторні дослідження магнітної поведінки речовин та матеріалів з використанням сучасних контрольно-вимірювальних приладів.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	5

2.4	Виконувати обробку результатів магнетохімічних досліджень з використанням спеціального програмного забезпечення.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	9
3.1	Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	5
3.2	Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	9
4.1	Брати на себе відповідальність за виконання експериментів	Лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7
4.2	Уміти вчитись самостійно для безперервного професійного розвитку.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7
4.3	Приймати обґрунтовані рішення, нести відповідальність за власні судження та результати.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ДК, ПЕ</i>	7

* *письмові тематичні контрольні роботи (ПТК)*
обов'язкові домашні (самостійні) роботи (ОДР)
допускові колоквиуми до лабораторних робіт (ДК)
письмовий іспит (ПЕ)

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. Модульна контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 4.2 – **15/9 балів**.
2. Модульна контрольна робота №2: РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3 – **15/9 балів**.
3. Лабораторна робота №1:РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 3.1, РН 3.2 – **6/4 балів**.
4. Лабораторна робота №2:РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3 – **6/4 балів**.
5. Лабораторна робота №3:РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4, РН 3.1, РН 3.2 – **6/5 балів**.
6. Лабораторна робота №4:РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4, РН 4.1, РН 4.2 – **6/2 балів**.
7. Лабораторна робота №5:РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4РН 3.1, РН 4.2 – **6/3 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, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, .

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: три теоретичних питання по 10 балів, одне практичне - 10 балів.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою 24 балів.

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він набрав не менше, ніж **36 балів**.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Модульна контрольна робота №1: не раніше **8 тижня** семестру;

Модульна контрольна робота №2: не раніше **15 тижня** семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Оцінка за дисципліну = Σ балів змістовних модулів + бали за письмовий іспит

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 <i>"Феноменологія магнітної поведінки речовин"</i>				
1	<p>Вступ. Магнетохімія, як розділ хімії, що вивчає електронну будову й структуру хімічних сполук, завдання магнетохімії, області застосування, можливості. Метод магнітної сприйнятливості. Поняття магнітної сприйнятливості (МС), залежність МС від напруженості зовнішнього магнітного поля, температури. Одиниці вимірювання МС у системах СІ та СГСМ. Основні види магнетизму. Класифікація речовин за їх відношенням до дії зовнішнього магнітного поля.</p> <p>Джерела магнетизму: електрони, що перебувають на внутрішніх заповнених оболонках, неспарені електрони зовнішніх оболонок, делокалізовані електрони. Взаємодії між електронами. Основні види магнітної поведінки речовин. Знак і порядок величини магнітної сприйнятливості для діамагнетиків, парамагнетиків, феро-, антиферо- і ферімагнетиків, залежність МС від зовнішнього поля й температури. Суперпарамагнетизм. Спінове та кластерне скло. Парамагнетизм Паулі й діамагнетизм Ландау. Приклади сполук, з різними магнітними властивостями</p>	2		12
2	<p>Способи вимірювання магнітної сприйнятливості. Методи, засновані на вимірюванні сили, що діє на тіло, поміщене в магнітне поле (силові): метод Гуї, метод Фарадея, метод Квінке, метод віскозиметра. Індукційні методи. Вібраційний магнітометр Фонера. SQUID</p>	1	3	12

ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II "Некооперативні види магнетизму"				
3	<p>Діамагнітна складова магнітної сприйнятливості. Дія магнітного поля на електрони, що перебувають на заповнених оболонках атомів і іонів. Теорема Лармора. Формула Ланжевена. Діамагнітна складова МС як функція атомного (молекулярного) радіуса. Зміна сприйнятливості атомів і іонів у групах і у періодах. Адитивна схема Паскаля. Атомні інкременти й конститутивні поправки. Природа конститутивних поправок. Приклади використання схеми Паскаля. Магнітна анізотропія й критерій ароматичності. Поляризаційний парамагнетизм (парамагнетизм Ван-Флека). Квантова природа парамагнетизму Ван-Флека. Обчислення діамагнітної й Ван-флеківської складової магнітної сприйнятливості. Формула Кірквуда. Діамагнетизм сольових систем. Діамагнетизм граничних вуглеводнів. Зв'язок між міцністю s-зв'язку і її магнетизмом. Ідеальний діамагнетизм.</p> <p>Парамагнітна складова магнітної сприйнятливості. Приклади парамагнітних систем: атоми, молекули, йони й дефекти решітки з непарним числом електронів, органічні вільні радикали; деякі об'єкти з парним числом електронів, включаючи молекули кисню й органічні дирадикали.</p>	4	3	12
4	<p>Орієнтація моментів у магнітному полі. Орієнтаційний парамагнетизм. Намагніченість ансамблю статистично розподілених за напрямками не взаємодіючих магнітних моментів, поміщених у магнітне поле. Закон Кюрі. Квантово-механічні уявлення про парамагнетизм. Межі використання закону Кюрі. Закон Кюрі-Вейсса. Експериментальне визначення параметрів рівняння Кюрі-Вейсса. Зв'язок константи Кюрі з магнітним моментом. Ефективний магнітний момент. Чисто спінові значення магнітного моменту. Магнетизм іонів перехідних металів. Розщеплення в нульовому полі. Розщеплення електронних рівнів електрон-електронними взаємодіями - символи термів, мультиплетність, вільні терми для різних d^n-іонів. Розщеплення термів на мультиплети спін-орбітальною взаємодією - спін-орбітальна взаємодія у вільних іонах, схеми L-S - і j-j - взаємодії, енергія спін-орбітальної взаємодії.</p>	2	6	12

	Розщеплення енергетичних рівнів кристалічним полем:– положення теорії кристалічного поля, положення теорії молекулярних орбіталей, теоретико-групові уявлення. Випадки сильного, слабого й проміжного поля. Вплив кристалічного поля на магнітні властивості координаційних сполук. Розкладання енергії за ступенями зовнішнього магнітного поля. Рівняння для намагніченості й статичної сприйнятливості.			
<i>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III "Магнетизм обмінних кластерів"</i>				
5	Магнетизм обмінних кластерів. Поняття обмінного кластера. Загальна схема одержання інформації про обмінні кластери з даних по магнітній сприйнятливості. Обмінний ефект і модель Гейзенберга-Дірака-Ван-Флека (ГДВФ) - синглет-триплетне розщеплення, різниця енергій синглетного й триплетного станів, обмінний пара-метр, діаграма спінових рівнів для димеру з $S_1=S_2=1/2$ – високо-температурна й низькотемпературна межі. Узагальнення ізотропного гамільтоніана для багатоядерних комплексів. Обмеження моделі ГДВФ. Механізми обміну - антиферомагнітний і феромагнітний обмін. Прямий і непрямий обмін. Залежність обмінного параметра від електронегативності лігандів	4		12
6	Типи обміну - обмін на 180° і обмін на 90° - шляху обміну. Радіальна залежність надобміну - зв'язок обміну й донорної здатності лігандів. Кутова залежність надобміну. Модель обмінних каналів. Типи обмінних кластерів: димери, магнітна сприйнятливість димерів, магнітні властивості димерів у різних температурних областях, інші типи кластерів. Мономерна домішка. Приклади аналізу магнітних властивостей конкретних сполук, що містять обмінно-зв'язані кластери	2	3	12

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – 15 год.

Лабораторні заняття - 15 год

Самостійна робота - 60 год.

9. Рекомендовані джерела

Основні:

1. В.О.Павленко, І.О. Фрицький. Вступ до магнетохімії. К.: ВПЦ «Київський університет», 2012. 167 с.
2. Olivier Kahn, Molecular Magnetism. VCH Publishers 1993, 380 p.
3. A.F. Orchard. Magnetochemistry, OXFORD University press, 2003, 173 p.

Додаткові:

1. Allan H. Morris/ The Physical Principles of Magnetism. John Wiley & Sons, 2001, 639 p.
2. A. Earnshaw. Introduction to magnetochemistry. Academic Press, 1968, 119 p.
3. P. Comba, T.W.Hambley. Molecular modeling of Inorganic Compounds, VCH, 1995, 205 h