

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет
Кафедра аналітичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи
Наталія УСЕНКО



_____ 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
МЕТОДИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ АБСОРБЦІЇ В АНАЛІЗІ

для здобувачів освіти

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальності **102 Хімія**
освітнього рівня **“бакалавр”**
освітньої програми **Хімія**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	VII
Кількість кредитів ECTS	6
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач (лектор): **Зінько Ліонель Степанівна**

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

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

Розробник: *кандидат хімічних наук, доцент Зінько Ліонель Степанівна*

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри аналітичної хімії



(Оксана ТАНАНАЙКО)


(підпис)

(прізвище та ініціали)

Протокол №6 від "22" червня 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від "29" червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії  (Олександр РОЇК)

Вступ

1. Мета дисципліни – вивчення теоретичних основ методів молекулярної абсорбційної спектроскопії та засвоєння практичних навичок застосування методів для визначення аналітів різної природи.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи неорганічної, органічної та фізичної хімії, хімічних та інструментальних методів кількісного аналізу та основи квантової хімії
2. Уміти проводити хімічний експеримент та розрахунки.
3. Володіти навичками проводити аналітичний експеримент відповідно до прописаної методики;

3. Анотація навчальної дисципліни. Курс «Методи молекулярної абсорбційної спектроскопії» присвячений теоретичним основам та практичному застосуванню методів молекулярно-абсорбційного аналізу. В курсі основна увага присвячена теоретичним основам та особливостям практичного застосування методів при визначенні мікрокомпонентів неорганічної та органічної природи в присутності складних матриць техногенного та технічного походження. Особлива увага приділена питанням застосування реагентів органічної природи в методах молекулярної абсорбційної спектроскопії, теорії дії органічних аналітичних реагентів, створенню умов вибіркового визначення одного аналіту в присутності іншого, та питанню правильного вибору спектрофотометричного реагенту для досягнення поставленої мети аналізу.

4. Завдання вивчення дисципліни – формування у студентів теоретичних знань основ спектрофотометричного методу аналізу, а також вміння застосовувати знання на практиці; практичних навичок, необхідних для вибору реагенту та експериментального визначення мікрокількостей елементів методами фотометрії, математичної обробки експериментальних даних та розв'язання задач з курсу.

Вивченні курсу сприяє формуванню у студентів низки компетентностей, зокрема загальних (ЗК) та спеціальних (СК): здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2), здатність працювати в команді (ЗК3), прагнення до збереження навколишнього середовища (ЗК9), здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1), здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії (СК4), здатність здійснювати типові хімічні лабораторні дослідження (СК7), здатність використовувати стандартне хімічне обладнання (СК9), здатність формулювати етичні та соціальні проблеми, які стоять перед хімією, та здатність застосовувати етичні стандарти досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (наукова доброчесність) (СК11)

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результати навчання (1.Знати; 2. Уміти; 3. Комунікація; 4. Автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання*	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Теоретичні основи фотометричного методу аналізу	Лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.2	Апаратурне оформлення методів молекулярної абсорбційної спектроскопії	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5

<i>Код</i>	<i>Результати навчання (1.Знати; 2. Уміти; 3. Комунікація; 4. Автономність та відповідальність)</i>	<i>Форми викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання*</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
1.3	Особливості будови основних класів органічних спектрофотометричних реагентів; принципи їх застосування в практиці методів	Лекції, практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.4	Основні способи оцінки та поліпшення метрологічних характеристик спектрофотометричних методик	Лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.5	Основи методів диференційної спектрофотометрії, а також методів двохвильової та похідної спектрофотометрії	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.6	Знати способи вимірювання аналітичного відгуку у розчині та твердій фазі	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
2.1	Проводити аналітичні розрахунки та розв'язувати задачі з основних розділів спецкурсу	Лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
2.2	Передбачити умови проведення аналітичної спектрофотометричної реакції визначення елементу/речовини за результатами розрахунків	Лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
2.3	Проводити фотометричне визначення елементів за методом градууювального графіка, а також спеціальними методами, зокрема методами двохвильової, похідної, диференційної, твердофазної спектрофотометрії;	Лабораторні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.4	Уміти аналізувати отримані результати, виявляти промахи та статистично обробляти результати аналізу.	Лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3	5
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі аналітичної хімії	Самостійні	ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту	Лабораторні,	ПтК-2, ПсК	5
4.2	Вміти оформляти результати експерименту в галузі аналітичної хімії та представляти їх перед цільовою аудиторією	Лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10

* активність під час лекційних – ПтК-1, лабораторних ПтК-2 і контроль самостійної роботи ПтК-3, підсумковий контроль ПсК

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

ПРН	РНД (код)													
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	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.		+		+	+	+	+	+	+		+	+		
P14. Здійснювати експериментальну роботу з метою перевірки гіпотез та дослідження хімічних явищ і закономірностей.		+		+	+	+	+	+	+		+	+		
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.				+			+					+		
P23. Грамотно представляти результати своїх досліджень у письмовому вигляді державною та іноземною мовами з урахуванням мети спілкування.										+			+	

7. Схема формування оцінки

Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за 100 - бальною шкалою .

Модульний контроль включає 3 змістовні модулі та комплексний підсумковий модуль (іспит).

Загалом за семестр: 3 модульні контрольні роботи, 9 лабораторних робіт.

- семестрове оцінювання

- 1.1. Виконання лабораторних робіт
- 1.2. Виконання самостійних робіт
- 1.3. Аудиторне бліц-опитування
- 1.4. Виконання контрольних робіт
- 1.5. Модульні контрольні роботи

- підсумкове оцінювання – комплексний підсумковий модуль -іспит.

симальна оцінка за семестр: **60 балів.**

Максимальна оцінка на іспиті: **40 балів.**

Максимальна загальна оцінка за курс: **100 балів.**

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

Оцінювання за формами контролю

Форми поточного контролю: оцінювання домашніх самостійних завдань; тестів та поточних перевірочних робіт, виконаних студентами під час лекційних бліц-опитувань, оцінка кожної лабораторної роботи (всього 9 робіт за семестр).

Оцінка за лабораторну роботу включає в себе:

- оцінку за теоретичну підготовку (усне або письмове опитування): **0 – 3 бали** (**0** – незадовільно, **1** – задовільно, **2** – добре, **3** – відмінно);
- оцінку за виконання навчальної задачі: **0–3 балів**, а саме: **0**–невірно (з помилкою більше 10 %), **1** – здано з помилкою 9–7%, **2** – здано з помилкою 6–5%, **3** – здано з помилкою 0-5 %);
- оцінку за оформлення протоколу: **0 – 3 бали** (**0** – незадовільно, **1** – задовільно, **2** – добре, **3** – відповідно всім вимогам);
- оцінку за активність при виконанні лабораторної роботи, всього **1 бал**.

Оцінка за лабораторну роботу *виставляється лише після оформлення* студентом детального опису виконання навчальної задачі у формі протоколу (в друкованій формі) на наступне лабораторне заняття. У випадку несвоєчасної здачі лабораторної роботи за кожний прострочений тиждень оцінка знижується на **2 бали**. Мінімальна оцінка за виконання лабораторної роботи становить суму балів за теоретичну підготовку (**0–3 бали**) та виконання навчальної задачі (**0–3 бали**), тобто максимум **6 балів**.

Оцінка за виконання кожного із завдань, що входять до «Самостійної розрахункової роботи 1 / 2» (всього по 5 завдань): **0–3 бали** (**0** – незадовільно, **1** – задовільно, **2** – добре (вірно, однак результат представлений не коректно), **3** – відмінно (вірний результат, представлений правильною кількістю значущих цифр).

Оцінка за усну відповідь: **0–3 бали** (**0**–незадовільно, **1**–задовільно, **2** – добре, **3** – відмінно).

Оцінка за доповнення – **1 бал**.

Модульний контроль: **3** модульних контрольних роботи (по **20 балів** кожна).

Змістовий модуль 1 (1,0 заліковий кредит = 30 год.). Включає **4** лекції, **2** лабораторних роботи (4 год. лабораторних занять), **1** модульну контрольну роботу, **1** самостійну розрахункову роботу (СР1) за темою: „Взаємодія органічних спектрофотометричних реагентів з металами. Кількісні закони світлопоглинання».

Розрахунок максимальної кількості балів за **ЗМ 1** наведено у табл.1.

Максимальна кількість балів – **65**.

Виконання кожної лабораторної роботи – **10 балів** (2 роботи по 10 балів=2×10=20 балів), написання модульної контрольної роботи – **20 балів**, написання тесту – **20 балів**, написання контрольної роботи – **20 балів**, самостійна робота (СР1) – **15 балів**, активність – **10 балів**.

Таблиця 1. Розподіл балів, що може отримати студент за змістовий модуль 1

Вид виконаної роботи	Тип діяльності	Кількість виконаних робіт	Вартість однієї роботи в балах		Сумарна кількість балів	
			min	max	min	max
Модульна робота 1	Обов'язковий	1	10	20	11	20
Виконання лаб. роботи	Обов'язковий	2	3	10	6	20
Самостійна робота 1	Бажаний	1	5	15	5	15
Активність студента, а саме:	Бажаний					
усна відповідь		2	1	3	2	6
доповнення		2	1	2	2	4
Сума балів за модуль					26	65

Змістовий модуль 2 (1,5 залікових кредити = 45 год.). Включає **5** лекцій, **4** лабораторних роботи, **1** модульну контрольну роботу, **1** аудиторну самостійну роботу з теми „Спектрофотометричне визначення металів та неметалів та органічних сполук»

Максимальна кількість балів – **70**. Виконання кожної лабораторної роботи – **10 балів**, написання модульної контрольної роботи – **20 балів**, 1 аудиторна контрольна робота – **15 балів**, активність – **5 балів** (у тому числі усна відповідь – **3 бали**, доповнення – **1 бал**).

Розрахунок максимальної кількості балів за **ЗМ2** наведено у табл. 2.

Таблиця 2. Розподіл балів, що може отримати студент за змістовий модуль 2

Вид виконаної роботи	Тип діяльності	Кількість виконаних робіт	Вартість однієї роботи в балах		Сумарна кількість балів	
			min	max	min	max
Виконання лаб. роботи	Обов'язковий	4	3	10	12	40
Модульна робота 2	Обов'язковий	1	10	20	12	20
Аудиторна робота	Бажаний	1	5	15	5	15
Активність студента, а саме:	Бажаний					
усна відповідь		1		3		3
доповнення		2		1		2
Максимальна сума балів за модуль					29	80

Змістовий модуль 3 (1,5 залікових кредита = 45 год.). Включає **6** лекцій, **3** лабораторних роботи (9 год. лабораторних занять), **1** модульну контрольну роботу, **1** самостійну розрахункову роботу (**СР2**) з тем „Способи детектування аналітичного відгуку» та «Способи поліпшення метрологічних характеристик методик».

Максимальна кількість балів – **70**. Виконання кожної лабораторної роботи – **10** балів, написання модульної контрольної роботи – **20** балів, самостійна робота 3 (**СР3**) – **15** балів, активність – **5** балів (у тому числі усна відповідь – **3** бали, доповнення – **1** бал).

Розрахунок максимальної кількості балів за **ЗМ 3** наведено у табл. 3.

Таблиця 3. Розподіл балів, що може отримати студент за змістовий модуль 3

Вид виконаної роботи	Тип діяльності	Кількість виконаних робіт	Вартість однієї роботи в балах		Сумарна кількість балів	
			min	max	min	max
Виконання лаб. роботи	Обов'язковий	3	3	10	9	30
Модульна робота 3	Обов'язковий	1	10	20	11	20
Самостійна робота 2	Бажаний	1	5	15	5	15
Активність студента, а саме:	Бажаний					
усна відповідь		1		3		3
доповнення		2		1		2
Максимальна сума балів за модуль					25	70

Обов'язковим для допуску до іспиту є виконання всіх обов'язкових видів (виконання **9** лабораторних робіт та написання МР1, МР2, МР3).

Комплексний підсумковий модуль у формі **іспиту: 40 балів**

За результатами семестрової діяльності студент отримує підсумкову оцінку за 100-бальною системою, яка розраховується як середньозважене оцінок за кожен з трьох модулів (див. табл. 4) у семестрі та оцінки за іспит за наведеною нижче формулою.

Таблиця 4. Розрахунок підсумкової оцінки (ПО) за семестр за результатами навчання

Змістові модулі	Змістовий модуль 1 (ЗМ1)	Змістовий модуль 2 (ЗМ2)	Змістовий модуль 3 (ЗМ3)	Комплексний підсумковий модуль (КПМ) - іспит	Підсумкова оцінка (ПО)
Вагові коефіцієнти, %	20 %	20 %	20 %	40 %	100 %
Перерахунковий коефіцієнт (к, відн. од)	$k_1=0,308$	$k_2=0,250$	$k_3=0,286$	$k_{\text{ісп}}=1,00$	–
кількість балів min рекоменд. min max	26 51 65	29 48 80	25 42 70	- 24 40	- 60 100
Оцінка в балах min рекоменд. min max	9 12 20	7 12 20	7 12 20	- 24 40	- 60 100

$$ПО = k_1 \cdot ЗМ1 + k_2 \cdot ЗМ2 + k_{\text{ісп}} \cdot КПМ$$

Для допуску до іспиту студент повинен набрати за результатами семестрової діяльності мінімальну кількість балів - **36 балів** і виконати усі види обов'язкових робіт (лабораторні, модульні роботи). Оцінка за іспит **не може бути меншою 24 балів** для отримання загальної позитивної оцінки за курс.

Для студентів, які за три змістові модулі отримали сумарну оцінку в балах менше, ніж критично-розрахунковий мінімум – **20 балів** для одержання допуску до іспиту передбачено можливість написання рефератів за темами, за які отримано недостатню кількість балів.

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка» від 31 серпня 2018 року

7.3. Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№ т е м и	НАЗВА ТЕМИ	Кількість годин		
		Лек- ції	Лаборат орні	Самос- тійна робота
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1. ОСНОВИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО МЕТОДУ АНАЛІЗУ				
	Вступ	2		
1	Основи методу молекулярної абсорбційної спектроскопії	2		6
2	Способи отримання та обробки експериментальних даних у спектrophотометрії	2		6
3	Хромофорні властивості речовин різної природи	2	4	4
Модульна контрольна робота 1			2	
Всього за модуль 1 (30 год.)		8	6	16
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2. СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ РЕЧОВИН РІЗНОЇ ПРИРОДИ				
4	Спектрофотометричне визначення металів	4	6	7
5	Спектрофотометричне визначення неметалів	4	4	8
6	Спектрофотометричне визначення речовин органічної природи	2		8
Модульна контрольна робота 2			2	
Всього за модуль 2 (45 год.)		10	12	22
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3. МЕТРОЛОГІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОТОМЕТРИЧНИХ МЕТОДИК				
7	Способи оцінки та поліпшення метрологічних характеристик спектrophотометричних методик	4	6	6
8	Інструментальні методи детектування сигналу в розчині	2		4
9	Методи вимірювання аналітичного відгуку в твердих зразках	2		6
10	Візуальні методи детектування сигналу	2	3	4
11	Напрямки застосування спектrophотометрії в аналізі	2		2
Модульна контрольна робота 3			2	
Всього за модуль 3 (45 год.)		12	11	22
Всього		30	28+1	60

Загальний обсяг - **120 год.**, **4** кредити,
Лекції – **30 год.**
Лабораторні – **28 год.**
Самостійна робота студентів – **61 год.**

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна

1. *Marchenko Z., Balcerzak M.* Spektrofotometryczne metody w analizie nieorganicznej. – Warszawa, 1998. – 526 p.
2. *Запорожець О.А., Зінько Л.С.* Фотометричні та люмінесцентні методи аналізу. Питання та задачі для самоконтролю. Для студентів 4 курсу хімічного факультету спеціалізацій “Аналітична хімія” та “Хімічний контроль навколишнього середовища” .- К.: ВПЦ «Київський університет», 2006. – 50 с.
3. *Запорожець О.А., Зінько Л.С.* Практикум зі спецкурсів „Методи молекулярної спектроскопії” та „Фотометричні й люмінесцентні методи аналізу”. Для студентів 4 курсу хімічного факультету спеціалізацій “Аналітична хімія” та “Хімічний контроль навколишнього середовища”. Ірпінь, 2007. – 108 с.
4. Комбіновані спектроскопічні та візуальні тест-методи аналізу: конспект лекцій вибраних розділів спецкурсу „Фотометричні та люмінесцентні методи аналізу” для студентів хімічного факультету / *О.А.Запорожець*. – К., 2005. – 40 с.
5. *Зінько Л.С., Запорожець О.А.* Твердофазна спектрометрія, УФ/Вид спектроскопія дифузного відбиття та кольорометрія в аналітичній практиці. Навчальний посібник. – Ірпінь: Видавництво та друкарня НУДПС України, 2020. – 90 с.
6. *Stability Constants of Metal ion Complexes: Part B. Organic Ligands / Ed. Douglas D. Perrin.*-Oxford-N.Y.-Toronto-Sidney-Paris-Francfurt: Pergamon Press, 1988.

Додаткова:

1. Вибрані розділи спецкурсу «Методи молекулярної спектроскопії в аналізі» (Оптичні методи аналізу) для студентів хімічного факультету / *О.А.Запорожець*. – 2003. – 60 с.
2. *D. Skoog, D. West, F. Holler, S. Crouch*, Fundamentals of Analytical chemistry, 9th ed, Mary Finch, 2013
3. *Marchenko Z., Balcerzak M.* Spektrofotometryczne metody w analizie nieorganicznej. – Warszawa, 1998. – 526 p.
- 14.Серія «Аналітична хімія елементів».