

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра неорганічної хімії**

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**



Заступник декана  
з навчальної роботи

Наталія УСЕНКО

« 11 » 06 2024 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
МЕТОДИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ**

**для студентів**

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

Форма навчання	<b>заочна</b>
Навчальний рік	<b>2024/2025</b>
Семестр	<u>2</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>українська</b>
Форма заключного контролю	<b>іспит</b>

Викладачі: к.х.н., доц, доцент, Зінько Л.С.  
к.х.н., асист., старший дослідник, Линник Р.П.

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

**КИЇВ - 2024**

Розробники:

Зінько Ліонель Степанівна, к.х.н., доцент, кафедра аналітичної хімії



Линник Ростислав петрович, к.х.н., старш. дослідник, кафедра аналітичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідуюча кафедри аналітичної хімії



Оксана ТАНАНАЙКО

Протокол № 8 від «28» травня 2024 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «9» квітня 2024 року № 8

Голова науково-методичної комісії



Олександр ПОЇК

«9» квітня 2024 року

**1. Мета дисципліни** – одержання комплексу професійних знань та практичних навичок щодо застосування відомих та новітніх методів молекулярної абсорбційної та молекулярної емісійної спектроскопії в аналізі та при встановленні кількісних характеристик рівноваг в розчині та на поверхні розділу фаз “розчин - сорбент”. Навчитися застосовувати теоретичні знання для отримання оптичних та люмінесцентних параметрів та обробки отриманих експериментальних даних з метою отримання констант рівноваг.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

1. *Знати неорганічну хімію, фізичну хімію, аналітичну хімію, статистичні методи в хімії.*
2. *Знання англійської мови на рівні B2*

**3. Анотація навчальної дисципліни:** навчальна дисципліна сприяє формуванню цілісної системи знань стосовно застосування методів молекулярної спектроскопії для дослідження властивостей речовини та сумішей, а також отримання фундаментальних констант за результатами дослідження рівноваг в розчині та на поверхні розділу фаз “розчин - сорбент”; розширення традиційних уявлень про фізико-хімічну картину світу на прикладі систем, в яких відбувається комплексоутворення; ознайомлення з основними закономірностями та практичними аспектами досліджень складних багатокомпонентних систем; ознайомити студентів з основними методами обробки даних досліджень комплексоутворення в розчині з використанням методів молекулярної абсорбційної та емісійної спектроскопії, з методами розробки, функціонування та застосування в аналізі флюоресцентних зондів.

**4. Завдання (навчальні цілі):**

- Сформуванню у студента чітке уявлення про роль та можливості методів молекулярної абсорбційної та емісійної спектроскопії при проведенні фундаментальних досліджень, зокрема протолітичних рівноваг та рівноваг реакцій комплексоутворення.
- Сформуванню в студента знання про методи дослідження комплексоутворення в розчині за результатами спектроскопічних досліджень та навички отримання спектроскопічних даних із застосуванням відповідних методів та сучасного спектроскопічного обладнання.
- Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (другий (магістерський) рівень вищої освіти (сьомий рівень НРК України), галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 «Хімія») дисципліна забезпечує набуття студентами таких *компетентностей*:

*інтегральної:*

Здатність розв’язувати складні задачі і проблеми у галузі хімії або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень та/або здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог.

*Загальних:*

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

*Фахових:*

ФК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК 3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.

## 5. Результати навчання за дисципліною:

Результати 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 та розуміти теорію методів молекулярної абсорбційної та молекулярної емісійної спектроскопії та напрямків застосування цих методів у аналітичній практиці.	Самостійне опрацювання рекомендованої літератури та презентаційного матеріалу.	Дистанційна контрольна робота 1, перевірка самостійної роботи Підсумкова модульна контрольна робота, іспит	5
1.2. Знати основи спектрофотометричних методів дослідження рівноваг протолітичних реакцій	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Дистанційні контрольні роботи, іспит, перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	10
1.3. Знати теоретичні основи спектрофотометричних методів дослідження рівноваг реакцій комплексоутворення	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Лабораторні роботи, Дистанційні контрольні роботи, іспит, перевірка завдань самостійної роботи	30
1.4. Знати основні поняття будови та принципу дії флуоресцентних сенсорів.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Дистанційна контрольна робота, іспит, перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання літературного пошуку.	5
1.5. Знати класифікацію флуоресцентних сенсорів за типом аналітичного сигналу.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Дистанційна контрольна робота, іспит, перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату. оцінювання літературного пошуку.	5
1.6. Знати про основні типи флуорофорів і центрів “зв'язування–розпізнавання” флуоресцентних сенсорів	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Дистанційна контрольна робота, іспит, перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату. оцінювання літературного пошуку.	5
2.1. Вміти здійснювати літературних пошук по методах дослідження рівноваг та застосуванню флуоросцентних сенсорів по наукометричним та патентним базам, проводити критичних аналіз отриманих даних,	Самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Захист літературного пошуку; перевірка завдань самостійної роботи.	15

презентувати результати свого дослідження.			
2.2. Вміти використовувати набуті знання для розрахунків, самостійного планування експерименту при дослідженні рівноваг реакцій комплексоутворення	Лекції, самостійне опрацювання рекомендованої літератури лабораторні роботи.	Лабораторні роботи.	15
3.1. Здатність обговорювати з викладачем та колегами отримані дані	Лабораторні роботи.	Захист літературного пошуку, захист протоколів лабораторних робіт.	5
4.1. Вміти самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнювати науково-технічну інформацію.	Самостійна робота	Захист літературного пошуку	5

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результат и навчання дисципліни Програмні результати навчання	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	2.1	2.2	3.1	4.1
ПРН1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
ПРН3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+	+	+		+	+	+		+
ПРН6. Знати методологію та організації наукового дослідження.		+	+					+	+	+

## 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:

#### - семестрове оцінювання:

1. Контрольна робота 1 (дистанційно) – РН 1.1- 1.3 – 10 балів/12 балів
2. Контрольна робота 2 – РН 1.4 – РН 1.6 – 10 балів/6 балів

3. Лабораторні роботи (виконання + звіт-протокол) – РН 1.3 – по 20/12 балів кожна. Робіт 2, тож сумарно можна отримати 40 балів/24 балів
  4. Самостійна робота 1 (дистанційно) – РН 1.1-1.2 – 10 балів /6 балів
  5. Самостійна робота 2 (дистанційно) – РН 1.4 -1.5 – 20 балів /12 балів
  6. Літературний пошук (дистанційно) – РН 2.1, 3.1; 4.1 – 10 балів/6 балів
- Сумарно можна отримати СБ=100 балів / 60 балів за семестр, перерахунковий коефіцієнт 0,6.

**- підсумкове оцінювання: у формі іспиту**

Підсумкова оцінка з освітнього компоненту в цілому: підсумковою формою контролю за яким встановлено іспит визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання (дистанційно та під час проведення аудиторних занять; оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час іспиту.

Форма проведення іспиту - письмово-усна, вид письмових завдань – комбіновані тестові та відкриті питання. Результатами навчання, які оцінюються під час проведення іспиту, є РН 1.1-1.6. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час іспиту, становить 40 балів за 100 бальною шкалою. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

**- умови допуску до підсумкового іспиту:**

Обов'язковою умовою допуску до іспиту є написання двох контрольних робіт, виконання двох лабораторних робіт та написання літературного пошуку. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

**7.2. Організація оцінювання:**

Терміни проведення оцінювання:

Контрольні роботи 1 і 2 проводяться дистанційно, оцінювання лабораторних робіт здійснюється протягом проведення аудиторного навчання. Літературний пошук передбачає, що студенти мають провести аналіз літератури на тему дослідження рівноваг реакцій методами молекулярної спектроскопії, створення та застосування в аналізі флуоресцентних зондів, та захистити узагальнений матеріал.

**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

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і практичних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	Лабораторні роботи	Самостійна робота
<b>«Методи молекулярної абсорбційної спектроскопії - інструмент для проведення фундаментальних досліджень»</b>				
1	<b>Лекція.</b> Напрямки застосування методів молекулярної спектроскопії як потужного інструменту для проведення фундаментальних досліджень. Спектрофотометричні методи дослідження протолітичних рівноваг та рівноваг реакцій комплексоутворення в розчині.	2		6
2	<b>Самостійна робота.</b> Характеристика рівноваг реакцій комплексоутворення. Типи комплексних сполук, що утворюються в розчині.			8
3	<b>Самостійна робота.</b> Дослідження рівноваг реакцій комплексоутворення. Трикутна діаграма “склад - властивість”. Класифікація методів дослідження комплексоутворення в розчині. Методи зсуву рівноваги та ізомольних серій.			8
4	<b>Самостійна робота.</b> Дослідження рівноваг реакцій комплексоутворення між речовинами, що супроводжуються утворенням оптично-активних форм. Встановлення факту комплексоутворення та визначення кількості комплексних часток у розчині методом ізобестичних точок.			8
5	<b>Лабораторна робота 1:</b> Встановлення факту комплексоутворення в розчині. Дослідження моноядерного комплексу.		2	10
6	<b>Самостійна робота.</b> Дослідження моноядерних комплексів високої стійкості. Встановлення складу та стійкості таких комплексів. Метод мольних відношень та метод Комаря.			8
7	<b>Лабораторна робота 2:</b> Встановлення складу та стійкості моноядерного комплексу високої стійкості.		2	10
8	<b>Самостійна робота.</b> Дослідження моноядерних комплексів середньої стійкості. Встановлення складу та стійкості таких комплексів. Методи Моланда, Гарвея-Менінга, Старіка-Барбонеля, Бента і Френча, розбавлення Бабка.			10
9	<b>Самостійна робота.</b> Дослідження складу та встановлення стійкості комплексів малої стійкості. Методи Асмуса, розбавлення Бабка, за двома точками діаграми зсуву рівноваги.			8
10	<b>Самостійна робота.</b> Дослідження ступінчастого комплексоутворення в розчині. Функція Фронеуса та функція Б'єрума. Основи спектрофотометричного методу Б'єрума. Визначення ступінчастих констант стійкості та констант утворення.			8
<b>«Методи молекулярної емісійної спектроскопії в аналізі»</b>				
5	<b>Самостійна робота.</b> Природа, основні закони, правила і кількісні характеристики люмінесценції. Методи молекулярної емісії в аналізі. Класифікація і метрологічні характеристики методів молекулярної емісії.			4
6	<b>Самостійна робота.</b> Флуоресцентні барвники. Основні вимоги до флуоресцентних барвників. Особливості будови люмінесцентних			6

	органічних сполук. Основні поняття про флуоресцентні мітки, зонди, індикатори. Основи флуоресцентної мікроскопії.			
7	<b>Лекція.</b> Основні поняття про флуоресцентні сенсори. Будова і принцип дії флуоресцентних сенсорів. Класифікація флуоресцентних сенсорів за типом аналітичного сигналу. Основні типи флуорофорів і центрів “зв'язування–розпізнавання” флуоресцентних сенсорів.	2		4
8	<b>Самостійна робота.</b> Основні фотофізичні механізми передачі сигналу у флуоресцентних сенсорах: фотоіндуковане перенесення електрона, фотоіндуковане перенесення заряду, внутрішньомолекулярне перенесення протона у збудженому стані, Фьорстерівське резонансне перенесення енергії збудження.			8
9	<b>Самостійна робота.</b> Застосування флуоресцентних сенсорів в аналізі. Сенсори для визначення температури, тиску, газів, полярності і в'язкості середовища, детектування малих молекул і іонів, біо- і біомакромолекул.			6
		4	4	112

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

Лекції – **4 год**.

Лабораторні роботи – **4 год**.

Консультації – **0 год**.

Самостійна робота – **112 год**.

## 9. Рекомендовані джерела

### Основні:

1. Lakowicz J.R. Principles of Fluorescence Spectroscopy. Third Edition. New York: Springer, 2006. – 954 p.
2. Valeur B., Berberan-Santos M.N. Molecular Fluorescence: Principles and Applications, 2nd Edition. – Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA, Weinheim, 2012. – 592 p.
3. Christian G. D., Dasgupta P. K., Schug K. A. Analytical Chemistry. 7th Edition. John Wiley & Sons, Inc., 2014. – 826 p.
4. Demchenko A.P. Introduction to Fluorescence Sensing. New York: Springer Science + Business Media B. V., 2009. - 586 p.
5. M.Beck, I.Nagypal Chemistry of Complex Equilibria. Academia Kiado, 1989.
6. F.R.Hartley, C.Burgess and R.M.Alkock. Solution Equilibria. New York - Chichester - Brisbane - Toronto, 1980.
7. Запорожець О.А. Лабораторні роботи до спецпрактикуму "Дослідження комплексоутворення у розчині та комп'ютерна обробка результатів". - ВПЦ "Тираж", 2005, 47 с.
8. Скопенко В.В., Григорьева В.В. Координаційна хімія. Практикум. Київ: Вища школа, 1984
9. Скопенко В.В., Зуб В.Я. Координаційна хімія, Практикум. Київ: Київ.ун-т, 2002

### Додаткові:

1. Yanhua Fu, Nathaniel S. Finney. Small-molecule fluorescent probes and their design // *RSC Adv.* - 2018. - 8. - P. 29051-29061.
2. Wan, Jiafeng, Zhang, Xiaoyuan, Zhang, Kai and Su, Zhiqiang. Biological nanoscale fluorescent probes: From structure and performance to bioimaging // *Reviews in Analytical Chemistry.* – 2020. – 39 (1). – P. 209–221.
3. Luling Wu, Chusen Huang, Ben P. Emery, Adam C. Sedgwick, Steven D. Bull, Xiao-Peng He, He Tian, Juyoung Yoon, Jonathan L. Sessler, Tony D. James. Förster resonance energy transfer

(FRET)-based small-molecule sensors and imaging agents // Chem. Soc. Rev. – 2020. – 49. – P. 5110–5139.

4. Stability constants of metal-ion complexes / Part A / Inorganic ligands / Compiled by E.Hogfeld.-IUPAC Chemical Data Series, N21. Ox-N.Y.-T.-S.-P.-F, Pergamon Press, 1982
5. Stability constants of metal-ion complexes / Part B / Organic ligands / Compiled by D.D.Perrin.-IUPAC Chemical Data Series, N21. Ox-N.Y.-T.-S.-P.-F, Pergamon Press
6. Critical stability constants. Part 2. Amine / Smith R.M., Martell A.E. , N.-Y., Plenum, 1975
7. Critical stability constants. Part 3. Other organic ligands / Smith R.M., Martell A.E. , N.-Y., Plenum,1977