

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
Хімічний факультет
Кафедра аналітичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана з навчальної роботи



Наталія Усенко
Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ
СУЧАСНИМИ МЕТОДАМИ

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 2022/2023
Семестр II
Кількість кредитів ECTS 5
Мова викладання, навчання та оцінювання
українська
Форма заключного контролю іспит

Викладач: доцент, к.х.н, доц. Ліонель ЗІНЬКО

Пролонговано: на 2022/2023 н.р. _____ (_____) « 29 » 06 2022 р.

на 2023/2024 н.р. _____ (_____) « ____ » _____ 20__ р.

Розробники: кандидат хімічних наук, доцент *Ліонель ЗІНЬКО*

Робоча програма дисципліни «Дослідження комплексоутворення сучасними методами» затверджена на засіданні кафедри аналітичної хімії

Протокол № 12 від “22” червня 2022 року

Завідуюча кафедрою аналітичної хімії



(підпис)

(Оксана ТАНАНАЙКО)

(прізвище та ініціали)

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від “29” червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії



(Олександр РОЇК)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – в ознайомленні студентів із сучасними експериментальними й теоретичними методами визначення складу та стійкості комплексних сполук різних типів, а також способами математичної, зокрема комп'ютерної, обробки експериментальних результатів дослідження багатокомпонентних систем, де відбувається процес комплексоутворення.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. *Знати основи неорганічної, органічної та фізичної хімії, хімічних та інструментальних методів кількісного аналізу, методів молекулярної спектроскопії та електрохімічних методів аналізу*
2. *Вміти проводити хімічний експеримент за протоколом, здійснювати вимірювання та спектрофотометрі, фотоелектроколориметрі, рН-метричне титрування; титрування з іон-селективним електродом; вміти побудувати діаграми рівноваг у розчині.*
3. *Володіти навичками математичної обробки інформації з використанням комп'ютерної техніки та програм Excel, Origin; методами статистичної обробки експериментальних результатів.*

3. Анотація навчальної дисципліни В результаті вивчення дисципліни студенти отримують теоретичні знання та практичні навички, необхідні для експериментального визначення складу та констант стійкості комплексних сполук.

4. Завдання (навчальні цілі) –

- Навчитися планувати та організувати хімічний експеримент, що дозволяє встановити наявність/відсутність комплексоутворення в розчині; обирати метод встановлення складу та стійкості комплексу за результатами попередніх досліджень;

- Навчитися реалізувати проведення хімічного експерименту та його обробки із застосуванням відповідного програмного забезпечення з метою встановлення складу та стійкості комплексних сполук

- Оволодіти навичками формулювання висновків за результатами своїх досліджень із залученням даних літератури та презентувати отримані експериментальні та розрахункові результати досліджень багатокомпонентних систем у присутності цільової аудиторії.

Вивчення дисципліни сприяє формуванню у студентів низки компетентностей, зокрема інтегральної (ІК), загальних (ЗК) та фахових (ФК): здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2), здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК3), здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК4), здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології (ЗК7), здатність працювати автономно (ЗК12), Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел (ЗК14), Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ

(ФК1), здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання (ФК2), здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент (ФК3), здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження (ФК4), здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними (ФК6), здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження (ФК9).

5. Результати навчання за дисципліною:

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)	<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
1.1. Особливості проведення експерименту (з обов'язковим дотриманням техніки безпеки) в хімічній лабораторії при дослідженні процесів комплексоутворення в розчині; методи постановки хімічного експерименту при дослідженні комплексів	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
1.2. Особливості та типи реакцій комплексоутворення в розчині;	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.3. Основи методів попередніх досліджень,; методів визначення ядерності комплексів та складу комплексних сполук залежно від стійкості	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.1. Знайти у першоджерелах інформацію про комплексоутворюючі властивості ліганда та комплексоутворюючу здатність центрального атома	Лекції, практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2. Планувати та організувати хімічний експеримент, що дозволяє встановити наявність/відсутність комплексоутворення в розчині; обрати метод встановлення складу та стійкості комплексу за результатами попередніх досліджень;	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3. Вміти фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту; реалізувати процедуру проведення спеціалізованого хімічного експерименту та його обробки з метою встановлення складу та стійкості комплексних сполук; формулювати висновки за результатами своїх досліджень із залученням даних літератури;	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)	<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
2.4. Презентувати отримані експериментальні та розрахункові результати в присутності цільової аудиторії.	Самостійні	ПтК-3	10
3.1. Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, що стосується комплексоутворення	Лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2. Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	Лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
4.1. Вміти самостійно спланувати, провести спеціалізований експеримент, обробити результати, інтерпритувати їх та проаналізувати з використанням даних літератури	Лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
4.2. Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі аналітичної	Самостійні	ПтК-3, ПсК	5

*Поточний контроль (активність під час практичних **ПтК-1** і лабораторних робіт **ПтК-2** та 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	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	3.2	4.1	4.2	
ПРН3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.		+		+			+						
ПРН8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.								+					
ПРН9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.			+		+					+			

ПРН	РНД (код)	РНД (код)											
		1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	3.2	4.1	4.2	
ПРН10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.		+				+					+	+	
ПРН14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.		+		+		+	+			+			+

Система контролю знань та умови складання іспиту. Спеціальна дисципліна **Дослідження комплексоутворення сучасними методами** оцінюється за модульно-рейтинговою системою. Вона складається з **3** модулів.

Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за 100-бальною шкалою.

Модульний контроль включає **3** змістові модулі і комплексний підсумковий модуль (**іспит**).

Загалом за семестр: 3 модульні контрольні роботи, 2 презентації результатів роботи, 8 лабораторних робіт.

Змістовий модуль 1 (7 лекцій)

Максимальна кількість балів – **100**. Передбачається проведення зі студентами **2-х** лабораторних занять, написання **1** модульної контрольної роботи на тему «**Попередні дослідження рівноваг у розчині**», виконання **3-х** самостійних робіт з питань «Основні типи реакцій комплексоутворення та номенклатура комплексних сполук, графічні методи та розрахункові методи визначення кількості часток у розчині за рангом матриці, визначення заряду комплексних сполук, написання домашньої самостійної роботи на тему: «Побудова моделі комплексоутворення та вибір експериментального методу дослідження заданої системи» та презентування отриманих результатів.

Виконання кожної лабораторної роботи оцінюється в **20** балів,

написання модульної роботи – **100** балів,

самостійна робота – **10** балів,

презентування отриманих результатів – **10** балів.

Оцінка за лабораторну роботу включає в себе:

- оцінку за теоретичну підготовку (усне або письмове опитування): **1 – 5** балів;
- експериментальні результати **1 – 5** балів;
- обробка експериментальних результатів **1 – 5** балів
- аналіз отриманих результатів (обговорення і висновки): **1 – 5** балів;

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовий модуль 1:

100 (модульна контрольна робота) $\times 0,4$ + 40 (лабораторні роботи) + 10 (самостійна робота) + 10 (презентація) = 100 балів.

Змістовий модуль 2 (лекцій 3)

Максимальна кількість балів – 100 балів. Передбачається проведення зі студентами 4 -х лабораторних занять, написання 2 -х самостійних робіт на тему Розрахування складу комплексної сполуки із застосуванням методу Старіка і Барбанелля, обробка результатів, отриманих методом Асмуса із застосуванням програми Clipr, презентація результатів досліджень та написання модульної контрольної роботи з теми «**Визначення складу та стійкості комплексів у випадку утворення у розчині однієї комплексної сполуки**».

Виконання кожної лабораторної роботи – 20 балів,
модульної контрольної роботи – 100 балів,
самостійна робота – 10 балів,
презентація отриманих результатів – 10 балів.

Оцінка за лабораторну роботу включає в себе:

- оцінку за теоретичну підготовку (усне або письмове опитування): $1 - 5$ балів ;
- експериментальні результати $1 - 5$ балів;
- обробка експериментальних результатів $1 - 5$ балів
- аналіз отриманих результатів (обговорення і висновки): $1 - 5$ балів;

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовий модуль 2:

100 (модульна контрольна робота) $\times 0,4$ + 80 (лабораторні роботи) + 10 (самостійна робота) + 10 (презентація) = 140 балів.

Змістовий модуль 3 (лекцій 5)

Максимальна кількість балів – 100 . Передбачається проведення зі студентами 2 -х лабораторних занять, написання 1 модульної контрольної роботи з теми «**Методи дослідження ступінчастого комплексоутворення та утворення різнолігандних комплексів**», 4 -х самостійних робіт: комп'ютерна (програми Clipr, HyperChem, SuperChem) обробка результатів потенціометричного титрування за методом Б'єррума, обробка результатів потенціометричного титрування за методом Ледена, застосування методу Назаренка В.А. для визначення константи копропорціювання різнолігандних комплексів, розрахункові задачі (побудова діаграм рівноваг комплексоутворення у розчині)

Виконання кожної лабораторної роботи – 20 балів,
написання модульної контрольної роботи – 100 балів,
самостійна робота – 5 балів (усього 20 балів)

Оцінка за лабораторну роботу (див. модуль 2).

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовий модуль 3:

100 (модульна контрольна робота) $\times 0,4$ + 40 (лабораторні роботи) + 20 (самостійна робота) = 100 балів.

Розрахунок підсумкової оцінки в балах

За результатами семестру студент отримує підсумкову оцінку за 100-бальною системою, яка розраховується як середньозважене оцінок за кожен з чотирьох модулів у семестрі та оцінки за іспит за наступною формулою:

$$ПО = k_1 \cdot ЗМ1 + k_2 \cdot ЗМ2 + k_3 \cdot ЗМ3 + k_{КПМ} \cdot КПМ$$

Модульні коефіцієнти наведено у табл.1.

Таблиця 1

Розрахунок модульних оцінок

	Змістовий модуль 1 (ЗМ1)	Змістовий модуль 2 (ЗМ2)	Змістовий модуль 3 (ЗМ3)	Комплексний підсумковий модуль (КПМ)	Підсумкова оцінка (ПО)
Вагові коефіцієнти (%)	20% $k_1=0,20$	30% $k_2=0,214$	10% $k_3=0,10$	20 % $k_{КПМ}=0,20$	100 %
Максимальна оцінка за модуль в балах	100	140	100	100	100
Максимальна оцінка в підсумкових балах	20	30	10	40	100

Підсумковий контроль знань студента проводиться у формі письмового екзамену, під час якого може бути отримана максимальна кількість **балів - 40**.

Підсумкова семестрова рейтингова оцінка складається з семестрової модульної та екзаменаційної оцінок і дорівнює **100 балам**.

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

Якщо за результатами модульно-рейтингового контролю студент отримав за три змістові модулі сумарну оцінку менше ніж 36 балів (підсумкових) і **не виконав хоча б одну лабораторну роботу**, то він/вона не допускається до іспиту і вважається таким, який не виконав усі види робіт, які передбачаються навчальним планом на семестр з дисципліни "Дослідження комплексоутворення сучасними методами".

За невчасно оформлені лабораторні роботи бали нараховуються за рівнянням: $y = a - 5b$, де а-оцінка за роботу, b - кількість тижнів, що минули після зазначеного терміну.

8. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛІНИ

НАВЧАЛЬНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ теми	НАЗВА ТЕМИ	Кількість годин		
		Лекції	Лабораторні заняття	Самостійні роботи
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1. «Попередні дослідження рівноваг у розчині»				
1	Мета та задачі спецкурсу. Методологічні підходи до встановлення складу, будови та стійкості комплексних сполук (КС). Основні поняття (комплексна сполука, центральний атом (ц.а.), внутрішня та зовнішня координаційна сфера, природа зв'язку у метал - ліганд, сучасна українська та міжнародна номенклатури КС).	2		
2	Основні типи реакцій комплексоутворення (КУ) залежно від природи ліганду та центрального атома (зокрема дентатності, заряду та значення координаційного числа ц.а.) та способу координації. Сольвати. Кінетично інертні та лабільні комплексні сполуки.	2		10
3	Кількісні характеристики реакцій КУ у розчині. Константи стійкості комплексних сполук (концентраційні, термодинамічні, стійкості та утворення), їх критична оцінка. Максимальне та мінімальне значення константи стійкості з точки зору термодинаміки: для випадку першої ступінчастої константи стійкості комплексної сполуки металу із монодентатним лігандом.	2		
4	Сучасні підходи до класифікації методів дослідження (критерії, їх критична оцінка, методологія дослідження комплексоутворення у розчині). Попередні дослідження: встановлення факту КУ у розчині, визначення кількості комплексних часток у розчині (метод ізобестичної точки).	2	2	
5	Визначення кількості комплексних часток у розчині (графічні методи для кількості забарвлених комплексних часток ≤ 3 , розрахункові методи (за визначенням рангу матриці). Встановлення наявності ступінчастого комплексоутворення.	2	2	10
6	Визначення ядерності комплексних сполук методом Б'єррума та методом, придатним для визначення константи стійкості моноядерного комплексу. Визначення заряду комплексних сполук.	2		20
7	Метод ізомолярних серій як метод попередніх досліджень.	2	2	20

	Побудова моделі комплексоутворення, її експериментальна перевірка та вибір експериментального методу визначення складу та стійкості комплексної сполуки.			
Модульна контрольна робота 1		2		
Всього за модуль 1		16	6	60
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2. «Визначення складу та стійкості комплексів у випадку утворення у розчині однієї комплексної сполуки»				
8	Класифікація методів дослідження КУ за стійкістю комплексних сполук. Якісна оцінка стійкості комплексних сполук методом ізомолярних серій. Визначення складу стійкого моноядерного комплексу методом молярних відношень. Визначення константи стійкості методом Комаря.	2	2	5
9	Методи дослідження складу та стійкості комплексів середньої стійкості (ізомолярних серій, Гарвея-Меннінга, Моланда, Старіка і Барбанелля, Бента і Френча, розбавлення А.К.Бабка. та малої стійкості (метод ізомолярних серій, зсуву рівноваги).	2	4	20
10	Методи дослідження складу та стійкості комплексів малої стійкості (метод Асмуса, за двома точками діаграми зсуву рівноваги, метод розбавлення).	2	2	20
Модульна контрольна робота 2			2	
Всього за модуль 2		6	8	45
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3. «Методи дослідження ступінчастого комплексоутворення та утворення різнолігандних комплексів»				
11	Методи дослідження ступінчастого комплексоутворення. Класифікація методів за способом математичної обробки експериментальних результатів: методи Б'єррума, Ледена, К.Б. Яцимирського. Характеристика КУ у розчині із застосуванням функцій утворення та закомплексованості (Фронеуса). Методи визначення констант утворення та ступінчастих констант стійкості.	2	2	12
12	Метод відповідних розчині Б'єррума, потенціометричні варіанти методів Б'єррума та Ледена	2	2	5
13	Методи дослідження різнолігандних комплексних сполук. Метод Назаренка В.А. Поняття про мікроконстанту	2		10
14	Побудова діаграм рівноваг у розчині комплексних сполук. Приклади застосування відомостей щодо складу та стійкості комплексних сполук в аналітичній практиці			18
Модульна контрольна робота 3		2		
Всього за модуль 3		8	4	45
Всього		30	20	150

Загальний обсяг **150** год.

Лекції – **30** год.

Лабораторні – **20** год.

Самостійна робота - **150** год.

9. СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

9.1. Основна:

1. Скопенко В.В., Савранський Л.І. Координаційна хімія, Київ: Київ.ун-т, 1992
2. Запорожець О.А. Лабораторні роботи до спецпрактикуму “Дослідження комплексоутворення у розчині та комп’ютерна обробка результатів” Київ: ВПЦ “Тираж”. 2005, 47 с.
3. Голуб О.А. Українська номенклатура в неорганічній хімії. Київ: Київ.ун-т, 1992
4. F.R.Hartley, C.Burges, and R.M.Alcock. Solution Equilibria. Ellis Horwood, 1980

9.2. Додаткова

4. Stability constants of metal-ion complexes/ Part A/ Inorganic ligands/Compiled by E.Hogfeld.-JUPAC Chemical Data Series, N21. Ox-N.Y.-T.-S.-P.-F, Pergamon Press, 1982
5. Stability constants of metal-ion complexes/ Part B/ Oorganic ligands/Compiled by D.D.Perrin.-JUPAC 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., 1978.

6. Critical stability constants. Part 3. Other organic ligands / Smith R.M., Martell A.E. , N.-Y., 1978.

6. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и приложения.-Харьков:Фолио, 2000.- 288 с.