

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“8” 05.2019 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ

для студентів

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **“бакалавр”**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019/2020**
Семестр **V**

(V семестр програми підготовки за ОР «бакалавр»)

Кількість кредитів ECTS **3 кредити**

Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**

Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Гайдай Сніжана Вікторівна**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробник: **Гайдай Сніжана Вікторівна, доц., к.х.н., доц.**



ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії



_____ (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від “9” квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “08” 05 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____ (____ Рoїк О.С.____)

“8” 05 2019 року

Протокол № від “ ” 2020 року

Голова науково-методичної комісії _____ (____ Рoїк О.С.____)

Протокол № від “ ” 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ (____ Рoїк О.С.____)

1. Мета дисципліни – формування теоретичних основ сучасних фізико-хімічних методів: мас-спектрометрії, рентгено-фотоелектронної спектроскопії та Мессбауерівської спектроскопії і практичних навичок їх використання.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати основи фізики та хімії;
2. Володіти необхідним математичним апаратом, включаючи інтегрування та диференціювання.

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках курсу «Мас-спектрометрія» вивчаються основні принципи методів Мас-спектрометрії, термодесорбції, рентген-фотоелектронної спектроскопії, Мессбауерівської спектроскопії; програмне забезпечення, яке використовується для обробки експериментальних даних.

4. Завдання: навчити студентів використовувати програмне забезпечення для аналізу і обробки результатів експериментальних досліджень, отриманих методами, що передбачені даним спецкурсом; аналізувати термодесорбційні криві та обирати підходи до отримання інформації про кінетичні параметри термодесорбції.

Зміст курсу входить в обов'язковий мінімум професійних знань хіміка, особливо науковця. Спеціальна навчальна дисципліна "Мас-спектрометрія" є базовою для вивчення таких спеціальних дисциплін як "Гетерогенний катализ", "Кінетика хімічних реакцій".

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати місце фізичних методів дослідження в системі хімічних наук	лекції, самостійні	ПтК-2, ПсК	5
1.2	Знати фізико-хімічні основи методів мас-спектрометрії, рентген-фотоелектронної спектроскопії та Мессбауерівської спектроскопії.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10

2. Вміння				
2.1	Вміти користуватися методами для дослідження стану поверхні каталізаторів різних процесів;	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
2.2	Вміти отримувати в повному обсязі інформацію з різних методів дослідження поверхні	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
2.3	Вміти аналізувати і обробляти інформацію, отриману з різних методів дослідження поверхні	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі гетерогенного каталізу	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та фахове спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти самостійно фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

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

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Знання									
Базові методологічні знання та розуміння основ сучасних фізико-хімічних методів дослідження гетерогенних каталізаторів		+	+						
Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії	+	+	+						
Знання хімічної термінології та номенклатури	+	+	+						
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин	+	+	+						
Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку		+	+						
Базові знання принципів і процедур фізичних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів			+	+	+			+	+
Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування каталізаторів			+	+	+			+	+
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування для рішення практичних задач		+	+						
Здатність описувати дані, отримані фізико-хімічними методами, а також пояснювати поведінку гетерогенних каталізаторів в тій чи іншій реакції, шукаючи взаємозв'язок з будовою.		+	+	+	+				
Уміння									
Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї			+			+	+		
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей				+	+	+	+	+	+
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.				+	+				

ПРН	РНД (код)									
	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Здатність приймати обґрунтовані рішення та рухатися до спільної мети.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	

7. Схема формування оцінки

Оцінка складається з суми балів отриманих за активність на практичних заняттях, виконання домашньої самостійної роботи, виконання лабораторних робіт та за модульні контрольні роботи.

7.1. Форми оцінювання студентів:

Модульні контрольні роботи — 39 балів (МКР)

Індивідуальна робота: Усні відповіді на практичних заняттях, доповнення, співбесіди за МКР — 21 бал (ІР)

1. Модульні контрольні роботи ЗМ1 та ЗМ2 складаються з 3-х частин:
 2. мінімального базового набору задач (питань) однакових для всіх студентів,
 3. практичних задач
 4. задачі на розкриття/розуміння теорії, або питання з теорії.
5. Модульні контрольні роботи ЗМ1 та ЗМ2 включають співбесіду щодо задачі на розкриття/розуміння теорії, або питання з теорії, та передбачає питання щодо цієї задачі або теоретичного питання, й додаткові питання на розуміння теоретичного матеріалу. Перелік теоретичних питань за модулями наведено нижче в кінці цієї програми.
6. Обов'язковим для отримання іспиту/заліку є написання **двох** модульних контрольних і виконання двох лабораторних робіт.

- підсумкове оцінювання іспит.

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

5 семестр

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Підсумковий контроль (іспит)	
	Min. – 19 балів	Max. – 31 балів	Min. – 17 балів	Max. – 29 балів	Min. – 24 бали	Max. – 40 балів
Усна відповідь (колоквіум)	2	3	1	2		
Виконання домашньої самостійної роботи	2	4	2	4		
Виконання лабораторних робіт	3	4	3	4		
Модульна контрольна робота 1	12	20				
Модульна контрольна робота 2			11	19		
Підсумкова контрольна робота						
Підсумковий контроль (іспит)					24	40

5 семестр

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Іспит	Разом
Max. балів	31	29	40	100
Min. балів*	19	17	24	60

* рекомендований критичний мінімум

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Мас-спектрометрія" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання модульних контрольних робіт, виконання експериментальних лабораторних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (критично розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для заліку або критично-розрахунковий мінімум для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання колоквіуму чи МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквіуму / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності (за умови іспиту)

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно / excellent
85 – 89	4	добре / good
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно / satisfactory
60 – 64		
0 – 59	2	не задовільно / fail

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

5 СЕМЕСТР

№ п/п	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	Лаб. роб.	Практ. роб	С/Р
Змістовий модуль 1 Метод мас-спектрометрії					
1	Вступ. Тема 1 Випромінювання.	2			
2	Тема 2. Основні положення мас-спектрометрії	2			6
3	Тема 3. Види іонів, методи отримання.	2			6
4	Тема 4. Мас-спектрометр і його характеристики.	2			
5	Тема 5. Динамічні мас-спектрометри	2			
6	Тема 6. Адсорбція. Термодесорбція	2	4		6
7	Тема 7. Рівняння Поляні-Вігнера. Методи визначення E_d	2	4		6
8	Тема 8. Метод визначення E_d за Цветановичем.	2			4
9	Тема 9. Аміачні каталізатори. Каталізатори окиснення CO	2			
10	Модульна контрольна робота 1	2			
Змістовий модуль 2 ЕСХА та ГР-спектроскопія для фізико-хімічних досліджень.					
13	Тема 10. Електронна спектроскопія для хімічного аналізу	2			5
14	Тема 11. Кількісний аналіз поверхні твердих тіл	2	2	1	6
15	Ситуативний тест				
16	Тема 12. Основні принципи Мессбауерівської спектроскопії	2			
17	Тема 13. Розрахунки і аналіз ГР-спектрів	2	4		6
18	Підсумкова модульна контрольна робота	2			
ВСЬОГО					
		30	14	1	45

Загальний обсяг 90 год.¹, в тому числі:

Лекцій – 30 год.

Лабораторних робіт – 14 год.

Практичних робіт – 1 год

Самостійна робота - 45 год.

¹ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

Рекомендована література:

Основна:

1. Робертс М., Макки Ч. Химия поверхности раздела металл-газ. - М: Высшая школа.- 1981.
2. Киттель Ч. Элементарная физика твердого тела.- М: Высшая школа.- 1965.
3. К.Зигбан.К.Нордлинг й др. Электронная спектроскопия. М: Наука.- 1971.
4. Драго Р. Физические методы в химии, т. I, 2. М: Высшая школа.- 1981.
5. Скляр Л.В. Реакции на поверхности катализаторов в условиях программированного нагрева // Успехи химии.- 1986.- Т.55,вып.3.-С.450-461.
6. Іщенко О.В. Мас-спектрометрія.- К: Київський університет.- 1998.
7. Мессбауэр Р. Резонансная спектроскопия γ -излучения. М: Наука.- 1970.
8. Гольданский В.И. Химическое применение Мессбауэровской спектроскопии. М: Наука.- 1970.
9. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии.- М: БИНОМ. Лаборатория знаний.- 2003.

Додаткова:

10. Нефедов В.И. Физические основы рентгеноэлектронного анализа состава поверхности // Поверхность.- 1982.- Т.1.- С. 4-19.
11. Кучеренко Е.Т. Справочник по физическим основам вакуумной техни-ки.- К: Вища школа.- 1981.
12. Барнард Дж. Современная масс-спектрометрия.- М: Наука.- 1957.
13. Керрингтон Л, Мак-Лечлан З. Магнитный резонанс и его применение в химии. М: Наука.- 1970.
14. Ландау Л., Смородинский Я. Лекции по теории атомного ядра.- М: Высшая школа.- 1955.

ПИТАННЯ НА ІСПИТ/ЗАЛІК

Методи іонізації.
Іонізація атомів та молекул.
Види іонів при іонізації.
Молекулярні іони.
Уламкові іони.
Іони, що перегруповуються.
Метастабільні (дифузійні) іони.
Від'ємні іони.
Багатозарядні іони.
Стабілізація заряду при іонізації.
Основні аспекти при аналізі мас-спектрів. Ізотопний патерн.
Термодесорбція і хроматографічний метод аналізу продуктів. Вимоги до кожного методу.
Переваги і недоліки.
Матеріальний баланс процесу термодесорбції.
Фізична і хімічна адсорбція.
Моделі процесів адсорбції і десорбції.
Фізичний зміст передекспоненти в рівнянні Поляні-Вігнера.
Статичні мас-спектрометри.
Характеристики статичного мас-спектрометра.
Омегатрон.
Часопролітний мас-спектрметр.
Квадрупольний мас-спектрометр.
Однополярний квадрупольний мас-спектрометр.
Метод обчислення E_d , який оснований на визначенні за однією точкою (T_m).
Метод обчислення E_d , який оснований на зміні швидкості нагріву зразка (I порядок).
Метод обчислення E_d , який оснований на зміні швидкості нагріву зразка (II порядок).
Метод Цветановича для десорбції першого порядку.
Метод Цветановича для десорбції другого порядку.
Енергія Фермі.
Рівень вакууму.
Робота виходу електрона.
Фотоелектронна емісія з металів та напівпровідників.
Оже-електрони.
Обчислення енергії зв'язку з даних, які отримані з метода РФС.
Інтенсивність рентгено-електронних ліній.
Ізомерний зсув в методі РФЕС.
Кількісний аналіз поверхні твердих тіл за методом РФС.
Мессбауерівська спектроскопія. Умови резонансу.
Випромінювання γ -квантів ядрами.
Енергія віддачі.
Ефект Доплера.
Спіновий момент у ядер.
Будова мессбауерівського спектрометра.
Квадрупольна взаємодія. Надтонка взаємодія в ГР-спектрах.