

**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
РЕЗОНАНСНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

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 резонансних фізико-хімічних методів: рентгено-фотоелектронної спектроскопії та Мессбауерівської спектроскопії, а також методу мас-спектрометрії 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 «Резонансні методи дослідження» вивчаються основні принципи методів термодесорбції з використанням мас-спектрометра як детектора частинок, рентген-фотоелектронної спектроскопії, флуоресценції, Мессбауерівської спектроскопії; програмне забезпечення, яке використовується для обробки експериментальних даних. Особлива увага приділяється точності, можливостям і доступності кожного методу.

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, інтерпретувати рентген-фотоелектронні і мессбауерівські спектри, аналізувати ізомерні зсуви, користуватися базами даних.

Зміст курсу входить в обов'язковий мінімум професійних знань хіміка, особливо науковця. Спеціальна навчальна дисципліна "Резонансні методи дослідження» є базовою для вивчення таких спеціальних дисциплін як "Гетерогенний каталіз", "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 катализаторів		+	+				+		
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 катализаторів				+	+	+		+	+
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 катализаторів 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					+	+	+	+	+

ПРН	РНД (код)									
	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.				+	+		+			
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.			+		+	+	+	+	+	
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.						+	+	+	+	
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+	+							
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співставляти їх з результатами, отриманими іншими методами.	+				+	+	+			
Здійснювати аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.			+			+	+			
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.			+			+	+			
Комунікація Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.			+			+	+	+	+	
Вміння коректно використовувати мовні засоби в професійній діяльності залежно від мети спілкування.			+			+	+			
Вміння відображати результати своїх наукових досліджень у письмовому вигляді.			+		+	+	+	+	+	
Здатність до презентації результатів своїх досліджень.			+			+	+			
Здатність працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії.			+	+	+	+	+	+	+	

ПРН	РНД (код)									
	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.			+		+	+	+	+	+	
Автономія та відповідальність Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.	+							+	+	
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
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. – 18 балів	Max. – 30 балів	Min. – 18 балів	Max. – 30 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	11	19				
Модульна контрольна робота 2			12	20		
Підсумкова контрольна робота						
Підсумковий контроль (іспит)					24	40

5 семестр

	Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2	Іспит	Разом
Max. балів	30	30	40	100
Min. балів*	18	18	24	60

* рекомендований критичний мінімум

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Резонансні методи дослідження" (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 Електронна спектроскопія для хімічного аналізу та гамма-резонансна спектроскопія.				
1	Тема 1 Електрони в твердих тілах.	2			
2	Тема 2. Зонна теорія твердих тіл. Зони Бриллюена. Ефективна маса електрона. Електропровідність металів.	2			6
3	Тема 3. Електронна спектроскопія для хімічного аналізу. Оже-електрони і рентгенівські кванти.	2			6
4	Тема 4. Обчислення енергії зв'язку з даних РФЕС. Хімічні зсуви в електронних спектрах. Кількісний аналіз поверхні твердих тіл. Обрахунок спектрів РФЕС.	2	2		
5	Тема 5. Основні принципи Мессбауерівської спектроскопії	2			6
6	Тема 6. Випромінювання γ -квантів ядрами. Умови резонансу. Енергія віддачі. Ефект Доплера.	2			6
7	Тема 7. Надтонка взаємодія в ГР-спектрах. Обрахунок Мессбауерівських спектрів.	2	2		4
8	Модульна контрольна робота 1	2			
	Змістовий модуль 2 Метод мас-спектрометрії				
9	Тема 8. Випромінювання. Основні положення мас-спектрометрії	2			
10	Тема 9. Мас-спектрометр і його характеристики. Види мас-спектрометрів	2	4	1	6
11	Тема 10. Адсорбція. Термодесорбція	2			5
12	Тема 11. Рівняння Полянї-Вігнера. Методи визначення E_d	2			6
13	Тема 12. Метод визначення E_d за Цветановичем	2	6		
14	Тема 13. Аміачні каталізатори. Каталізатори окиснення CO	2			
15	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. Киттель Ч. Элементарная физика твердого тела.- М: Высшая школа.- 1965.
2. Нефедов В.И. Физические основы рентгеноэлектронного анализа состава поверхности // Поверхность.- 1982.- Т.1.- С. 4-19.
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. Іщенко О.В. Мас-спектрометрія.- К: Київський університет.- 1998.
6. Мессбауэр Р. Резонансная спектроскопия γ -излучения. М: Наука.- 1970.
7. Гольданский В.И. Химическое применение Мессбауэровской спектроскопии. М: Наука.- 1970.
8. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии.- М: БИНОМ. Лаборатория знаний.- 2003.

Додаткова:

1. Робертс М., Макки Ч. Химия поверхности раздела металл-газ. - М: Высшая школа.- 1981.
2. Складов Л.В. Реакции на поверхности катализаторов в условиях программированного нагрева // Успехи химии.- 1986.- Т.55,вып.3.-С.450-461.
3. Нефедов В.И. Физические основы рентгеноэлектронного анализа состава поверхности // Поверхность.- 1982.- Т.1.- С. 4-19.
4. Кучеренко Е.Т. Справочник по физическим основам вакуумной техни-ки.- К: Вища школа.- 1981.
5. Барнард Дж. Современная масс-спектрометрия.- М: Наука.- 1957.
6. Ландау Л., Смородинский Я. Лекции по теории атомного ядра.- М: Высшая школа.- 1955.