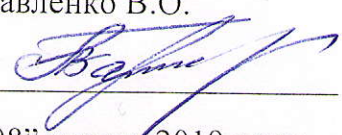


КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

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


“08” травня 2019 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СУЧАСНІ МЕТОДИ ВСТАНОВЛЕННЯ СТРУКТУРИ
ХІМІЧНИХ СПОЛУК ТА МАТЕРІАЛІВ

для студентів

галузі знань 10 Природничі науки
спеціальність 102 Хімія
освітній рівень “магістр”
освітня програма Хімія
вид дисципліни предмет

Форма навчання денна
Навчальний рік 2019/2020
Семестр III
(III семестр програми підготовки за ОР «магістр»)
Кількість кредитів ECTS 9 кредитів
Мова викладання, навчання та оцінювання
українська
Форма заключного контролю іспит

Викладачі (лектори): Амірханов Володимир Михайлович
Колендо Олексій Юрійович
Пивоваренко Василь Георгійович
Алексеев Сергій Олександрович
Роїк Олександр Сергійович

Пролонговано: на 2020/2021 н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.
на 2021/2022 н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробники: Амірханов Володимир Михайлович, проф., д.х.н., проф.

Колендо Олексій Юрійович, проф., д.х.н., проф.

Пивоваренко Василь Георгійович, проф., д.х.н., проф.

Алексєєв Сергій Олександрович, доц., к.х.н., доц.

Роїк Олександр Сергійович, доц., д.х.н., доц.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри неорганічної хімії

(Слободяник М.С.)

Протокол № 10 від "19" березня 2019 року

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри хімії ВМС

(Савченко І.О.)

Протокол № від " " 2019 року

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри органічної хімії

(Хиля В.П.)

Протокол № 15 від "14" березня 2019 року

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри аналітичної хімії

(Тананайко О.Ю.)

Протокол № 6 від "09" квітня 2019 року

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії

(Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від "09" квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від "08" травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії (Роїк О.С.)

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами основних теоретичних положень комплексу методів встановлення структури хімічних сполук та матеріалів, а саме: флуоресцентної спектроскопії, металоцентованої люмінесценції, рентгенографії кристалічних матеріалів, методів дослідження структурно-сорбційних параметрів та іонізації сполук. Формування теоретичного підґрунтя для розуміння принципів застосування, переваг, недоліків та обмежень згаданих методів. Одержання практичних навичок, що дозволяють поєднувати теоретичні знання із вивченням структури хімічних сполук та матеріалів та здійснювати вибір оптимальних методів дослідження в залежності від об'єкту та мети.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Даний курс базується на знаннях курсів хімії високомолекулярних сполук, неорганічної хімії, аналітичної хімії, органічної хімії та фізичної хімії. Успішне проходження вказаної дисципліни передбачає знання із курсів вищої математики, фізики, стереохімії та квантової хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни

Представлена навчальна дисципліна “Сучасні методи встановлення структури хімічних сполук та матеріалів” дає студентам уявлення про теоретичні основи та приклади застосування ряду експериментальних методів: флуоресцентної спектроскопії, металоцентованої люмінесценції, рентгенографії кристалічних матеріалів, методів дослідження структурно-сорбційних параметрів та іонізації сполук. Вивчаються підходи до аналізу та інтерпретації експериментальної інформації, отриманої за допомогою вказаних методів дослідження. Пояснюється переваги та обмеження сучасних методів дослідження структури сполук та матеріалів.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформувані уявлення про фізичний зміст та природу явищ, які лежать в основі розглянутих методів дослідження структури хімічних сполук та матеріалів - флуоресцентної спектроскопії, металоцентованої люмінесценції, рентгенографії кристалічних матеріалів, методів дослідження структурно-сорбційних параметрів та іонізації сполук.;
- ознайомити студентів із прикладами застосування даних методів для дослідження різноманітних сполук та матеріалів;
- надати необхідний теоретичний базис для застосування методів, а також розуміння переваг, недоліків та обмежень розглянутих методів;

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати механізми виникнення та гасіння флуоресценції хімічних сполук, розуміти утворення електрорушійних сил та природу електродного потенціалу	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10

1.2	Знати та розуміти основи люмінесцентної спектроскопії, фактори, які впливають на розщеплення, інтенсивність і ширину спектральних ліній, принципи виникнення сенсibilізованої люмінесценції та механізми безвипромінювального внутрішньомолекулярного перенесення енергії.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.3	Розуміти теоретичні основи рентгенофазового та рентгеноструктурного методів. Знати їх переваги та обмеження при дослідженні кристалічних матеріалів.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.4	Знати фізичні методи, які використовуються для вимірювання структурно сорбційних параметрів матеріалів та розмірів наночастинок, та які розрахункові моделі використовуються для обробки їх результатів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
1.5	Студенти мають знати теоретичні основи методів іонізації хімічних сполук - FD, FAB, SIMS, MALDI. Розуміти переваги та недоліки цих методів у випадку високомолекулярних сполук.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2. Вміння				
2.1	Використовувати набуті знання та вміння для інтерпретації експериментальної інформації, отриманої за допомогою розглянутих методів дослідження.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3	10
2.2	Студенти повинні орієнтуватися в сучасних методах дослідження структури сполук та матеріалів та вміти обирати оптимальний метод для виконання конкретного практичного завдання.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2.3	Використовувати набуті знання для розрахунків та моделювання структури хімічних сполук та матеріалів.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, яка пов'язана із дослідженням структури речовин.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти самостійно інтерпретувати результати експериментальних методів, розглянутих в рамках курсу	практичні, самостійні	ПтК-2, ПсК	5

4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки та здійснювати професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища	практичні, самостійні	ПтК-2, ПсК	5
-----	--	-----------------------	------------	---

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

ПРН \ РНД (код)												
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Знання та вміння												
Знати сталі наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+	+							
Знати та розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми.	+	+	+	+	+	+	+	+				
Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення якісних та кількісних задач невідомої природи.	+	+	+	+	+	+	+	+				
Знати методи синтезу та аналізу хімічних сполук.	+	+	+	+	+	+	+	+				
Знати методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+	+	+	+	+	+				
Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+	+	+	+	+	+	+				
Знати іноземну мову на рівні B2	+	+	+	+	+				+		+	
Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.						+	+	+	+	+	+	+
Знати методологію процесів навчання й виховання, а також передові методи формування навичок організації самостійної роботи									+	+	+	+
Здійснювати систематизацію та критичний аналіз даних.						+	+	+	+	+		
Планувати, організовувати та здійснювати експериментальну роботу самостійно та автономно.						+	+	+	+	+	+	+
Проводити лабораторні процедури з використанням сучасних контрольно-вимірювальних приладів.						+	+	+				
Виконувати обробку результатів досліджень з використанням спеціального програмного забезпечення.						+	+	+	+	+	+	+

РНД (код) ПРН	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Обирати адекватні поставленій задачі методи комп’ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.						+	+	+	+	+	+	+
Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.						+	+	+	+	+		
Представляти науковий та практичний матеріал в письмовій та усній формах.						+	+	+	+	+	+	+
Представляти результати досліджень англійською мовою									+	+	+	+
Перекладати фахову літературу та розуміти наукові тексти хоча б однією іноземною мовою						+	+	+	+	+	+	+
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову доброчесність						+	+	+	+	+	+	+
Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організовувати свою роботу, складати звіт.						+	+	+	+	+	+	+
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.						+	+	+	+	+		
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для вирішення прикладних задач.						+	+	+	+	+		
Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Комунікація Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.						+	+	+	+	+	+	+
Працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії з урахуванням етичних норм.						+	+	+	+	+	+	+
Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.						+	+	+	+	+	+	+

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Автономія та відповідальність Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.											+	+
Брати на себе відповідальність за виконання експериментів.											+	+
Діяти соціально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Уміти вчитись самостійно для безперервного професійного розвитку.						+	+	+	+	+	+	+
Приймати обґрунтовані рішення, нести відповідальність за власні судження та результати.						+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час лекції та практичних занять;
- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

підсумкова контрольна робота
іспит.

7.2. Організація оцінювання:

3 семестр

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2	
	Min. – 18 балів	Max. – 30 балів	Min. – 18 балів	Max. – 30 балів
Усна відповідь	3	5	3	5
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	5
Модульна контрольна робота 1	12	20		
Модульна контрольна робота 2			12	20

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

* критично-розрахунковий мінімум

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Сучасні методи встановлення структури хімічних сполук та матеріалів" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання групових тематичних контрольних робіт, виконання 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 МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з *дозволу деканату* (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / 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

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і практичних занять

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин		
		лекції	Практичні	Самостійна робота
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I " Флуоресцентна спектроскопія у дослідженні хімічних сполук та їх розчинів "				
1	Флуоресцентна спектроскопія у стаціонарних умовах. Механізми гасіння флуоресценції. Агрегація сполук у збудженому стані.	2	4	12
2	Часово-розділена флуоресцентна спектроскопія. Міжмолекулярне та внутрішньо молекулярне фото перенесення електрону та внутрішньо молекулярне фотоперенесення заряду.	2	4	12
3	Резонансне перенесення енергії збудження. Внутрішньомолекулярне фотоперенесення протону.	2	4	12
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II " Металоцентрована люмінесценція "				
4	Специфіка люмінесцентного випромінювання. Класифікація процесів люмінесценції залежно від способу збудження випромінюючих часточок. Спонтанна люмінесценція. Особливості внутрішньоцентрової (металоцентрованої) люмінесценції. Молекулярні терми для сполук лантаноїдів (III). Спектри люмінесценції та спектри збудження люмінесценції лантаноїд(III) вмісних сполук	2	4	12
5	Механізми процесів гасіння люмінесценції центрального іону	2	4	12

	лантаноїду у координаційних сполуках. Час життя люмінесценції і квантовий вихід люмінесценції та способи їх кількісної оцінки. Діаграма Яблонського у випадку координаційних сполук лантаноїдів: синглетні та триплетні стани, внутрішня конверсія, інтеркомбінаційна конверсія, безвипромінювальні переходи.			
6	Електронно-коливальна структура спектрів люмінесценції та спектрів збудження люмінесценції як метод оцінки способу координації лігандів. Зв'язок штарківської структури спектрів люмінесценції координаційних сполук Європію із симетрією найближчого оточення центрального атому	2	4	12
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III "Рентгенографія кристалічних матеріалів"				
7	Методи генерування рентгенівського випромінювання: рентгенівські трубки, мікрофокусні джерела, синхротронне випромінювання. Монохроматизація та реєстрація рентгенівського випромінювання. Рівняння Брегга. Рентгенофазовий метод дослідження матеріалів.	2	4	12
8	Сім'я площин кристалічної ґратки (індекси Міллера). Поняття оберненої ґратки в дослідженні кристалічних тіл. Сфера Евальда. Основи рентгеноструктурного дослідження монокристалів.	2	4	12
9	Квадратичні форми для різноманітних кристалічних ґраток. Рентгенодифракційні методи встановлення макромолекулярних структур: молекулярного заміщення, ізоморфного заміщення та фазування за допомогою аномальної дисперсії.	2	4	12
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III "Дослідження наноструктурованих матеріалів"				
10	Параметри наноструктурованих матеріалів та фізикохімічні явища, що відбуваються при адсорбції парів. Що таке наноструктуровані матеріали і навіщо їх досліджувати? Питомі поверхня, об'єм пор та розподіл пор за розмірами. Фрактальна розмірність. Специфічна та неспецифічна адсорбція. Адсорбція парів: рівняння Ленгмюра та БЕТ. Явище капілярної конденсації: рівняння Кельвіна. Класифікація пор за розмірами: мікро-, мезо, та макропори.	2	4	12
11	Методи дослідження структурно-сорбційних параметрів. Критерії вибору адсорбату для структурно-сорбційних досліджень. Ізотерми адсорбції азоту. Класифікація ізотерм за ІЮПАК. Мезопористі адсорбенти та метод ВЖН. Критерії наявності мікропор в адсорбентах: метод t-plot. Методи розрахунку розподілів мікропор за розмірами. Ртутна порометрія – метод дослідження макропор.	2	4	12
12	Оптичні методи дослідження наночастинок. Явище світлорозсіювання. Рівняння Релея. Метод динамічного світлорозсіювання: фізичні основи, математичне наближення, можливості та обмеження. Вимірювання зета-потенціалу. Метод лазерної дифракції.	2	4	12
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ III "Методи іонізації високомолекулярних сполук"				
13	Методи іонізації високомолекулярних сполук - методи FD, FAB,	2	4	12

	SIMS, MALDI. Переваги та недоліки цих методів у випадку високомолекулярних сполук. Роль матриці в одержанні мас-спектра високомолекулярної сполуки			
14	Принцип роботи детектора TOF – лінійного та з рефлектроном, різниця в MALDI спектрах, формула залежності дрейфу від співвідношення маса/заряд.	2	4	12
15	Правила підбору катіонізуючого агента Умови одержання коректного мас-спектра полімерів – вплив різних факторів.	2	4	12

Загальний обсяг - **270 год.**, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Практичні заняття – **60 год**

Самостійна робота - **180 год.**

Література

Основна

1. Лакович Дж. Основы люминесцентной спектроскопии // М., Мир, 1986. – 496 с.
2. Драго Р. Физические методы в неорганической химии. М.: Мир. 1981. – т.1 422 с., т. 456 с.
3. Амірханов В.М. Люмінесценція координаційних сполук лантаноїдів. – ВПЦ «Київський університет». 2017. – 79 с.
4. Золин В. Ф. Редкоземельный зонд в химии и биологии / В. Ф. Золин, Л. Г. Коренева. – М.: Наука, 1980. – 349 с.
5. Bünzli J-C. G., S. V. Eliseeva Photophysics of Lanthanoid Coordination Compounds // 2013. - Elsevier Ltd.
6. J.R. Lakowicz. Principles of fluorescence spectroscopy. Second edition. Kluwer Academic/Plenum Publishers NY, Boston, Dordrecht, London, Moscow, 1999, 698 P.
7. B. Valeur. Molecular Fluorescence. New-York, Wiley-VCH., 2002.
8. Demchenko A.P. Introduction to Fluorescence Sensing// 2009.- Springer.- 586 P.
9. В.П. Казіміров, Е.Б. Русанов. Рентгенографія кристалічних матеріалів - – ВПЦ «Київський університет». 2016. – 287 с.
10. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость. - М.: Мир, 1984. - 306 с.

Додаткова

1. С.Паркер. Фотолюминесценция растворов. // М., Мир, 1972. – 510 с.
2. Bünzli J-C. G. Lanthanide Luminescence: From a Mystery to Rationalization, Understanding and Applications // Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. -2016
3. R. P. Haugland. "Handbook of Fluorescent Probes and Research Products. Ninth Edition". Molecular Probes, 2002 Eugen, OR, USA.
4. Loew, L. M. Spectroscopic Membrane Probes. Boca Raton, CRC Press. 1988. 297 P.
5. J. S. Kim, D. T. Quang. Calixarene-Derived Fluorescent Probes. Chem. Rev. 2007, 107, 3780-3799.
6. L. Fabbrizzi, A. Poggi. Sensors and switches from supramolecular chemistry/ Chem. Soc. Rev. 1995, 24, 197-202.
7. D. Altschuh, S. Oncul2 and A. P. Demchenko. Fluorescence sensing of intermolecular interactions and development of direct molecular biosensors. Review. J. Mol. Recognit. 2006; 19: 459–477.

8. A.P. Demchenko, The future of fluorescence sensor arrays. TRENDS in Biotechnol, 23, 2005, 456-460.
9. В.Г. Пивоваренко. "Синтез, будова і властивості багатоканальних флуоресцентних зондів на основі 1,3-діариліденкетонів, дициклопентано[b,e]піридинів та 3-гідрокси-хромонів. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора хімічних наук. Київ, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 2007, 580 с.
10. Д. Браун, А. Флойд, М. Сейнзбери. Спектроскопия органических веществ. М., МИР, 1992, 300 с.
11. Бартлоп Дж., Койл Дж. Вобужденные состояния в органической химии. М., 1978, 446 с

Інтернет ресурси

<https://www.scopus.com/>

<http://login.webofknowledge.com/>

<http://www.nbuv.gov.ua/>

<http://www.library.univ.kiev.ua>

<https://www.researchgate.net/>

<https://www.malvernpanalytical.com/>