

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ «ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ В ХІМІЇ»



Ступінь освіти	<u>бакалавр</u>
Освітня програма	<u>Хімічні технології та інженерія</u>
Тривалість викладання	<u>7-й та 8-й семестр</u>
Заняття (на тиждень):	<u>2024/2025 н.р.</u>
7 семестр, 14 чверть лекції:	<u>2 години</u>
практичні заняття:	<u>3 години</u>
8 семестр, 15 чверть лекції:	<u>2 години</u>
практичні заняття:	<u>3 години</u>

Консультації: щотижня 2 години за розкладом, погодженим зі здобувачами вищої освіти

Онлайн-консультації: Teams або Zoom.

Кафедра, що викладає Хімії

Викладач:

Черданцева Ксенія Олександрівна

Старший викладач, канд. хім. наук

Персональна сторінка

https://himik.nmu.org.ua/ua/about_dep/Cherdantseva%20Kseniya%20Oleksandrivna.php

E-mail:

cherdantseva.k.o@nmu.one

1. Анотація до курсу

Фізичні методи дослідження в хімії – важливий курс, який має особливе значення при підготовці бакалаврів за напрямом «Хімічні технології та інженерія». Вивчення курсу дає теоретичні основи сучасних фізичних методів дослідження, а також вміння використовувати ці методи на практиці та за результатами досліджень визначати характеристики молекул, речовин, явищ, процесів.

2. Мета та завдання курсу

Мета – формування компетентностей з питань дослідження хімічних речовин. Поглиблення теоретичних та практичних знань у галузі використання фізичних методів дослідження.

Завдання курсу:

- поглиблене вивчення теоретичних основ та методології застосування фізичних методів дослідження;
- знайомство студентів з сучасними експериментальним обладнанням, яке може бути застосованим для дослідження молекул, речовин, хімічних процесів та явищ;

3. Результати навчання

- У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен
- **знати:**
- теоретичні положення методів ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР, УФ і мас-спектроскопії;
- основні фізико-хімічні закони, на яких ґрунтується спектральний аналіз;
- функції основних структурних елементів приладів, що використовуються у фізичних методах дослідження;
- **вміти:**
- на основі даних фізичних методів дослідження запропонувати склад та будову хімічної сполуки;
- описати спектри за даною структурною формулою;
- проводити інтерпретацію спектрів: визначати основні спектральні характеристики і робити на їх підставі висновки про хімічний склад і будову сполук.

4. Структура курсу

ЛЕКЦІЇ
1. Основні поняття, предмет і задачі курсу.
Зміст і структура курсу. Загальні положення про курс.
Особливості і області застосування фізичних та фізико-хімічних методів аналізу.
Класифікація фізичних та фізико-хімічних методів якісного і кількісного аналізу.
Стисла характеристика деяких основних фізичних та фізико-хімічних методів аналізу.
2. Електронна спектроскопія.
Молекулярна спектроскопія УФ і видимій області
Квантово-хімічна теорія електронної спектроскопії.
Зв'язок молекулярної структури і спектрів.
3. Інфрачервона (ІЧ) спектроскопія.
Характеристика теоретичних основ інфрачервоної спектрометрії: коливання атомів в просторі, взаємодія коливань, геометрія молекул.
Інтерпретація спектрів по характеристичним груповим частотам органічних молекул.
4. Спектроскопія комбінаційного розсіювання світла (КР).
Сутність методу.
Класична теорія розсіювання випромінювання.
Порівняння ІЧС та СКР
5. Ядерний магнітний резонанс.
Теорія ядерного магнітного резонансу
Основні параметри ЯМР-спектрів: число сигналів, положення сигналів, інтенсивність сигналів, розщеплення сигналів.
Природа хімічного зсуву у методі ядерного магнітного резонансу та фактори, що визначають його величину.
Характеристика протонного магнітного резонансу.
6. Мас-спектрометрія.
Характеристика теоретичних основ методів мас-спектрометрії, апаратура.
Аналіз мас-спектрів електронної іонізації (ЕІ). Ідентифікація молекулярного іону.
Аналіз фрагментації молекулярного іону у спектрі ЕІ.
Визначення молекулярної формули речовини по мас-спектрам.
ПРАКТИЧНІ ЗАНЯТТЯ
1. Теоретичні основи спектроскопії УФ- та видимої області
2. Дослідження електронних спектрів поглинання неорганічних та органічних речовин та матеріалів
3. Розшифрування ІЧ спектрів. Інтерпретація ІЧ спектру. Проведення структурного аналізу за ІЧ спектром.
4. Основні поняття спектроскопії ЯМР. Хімічний зсув, способи його вираження. Спін-спінова взаємодія (ССВ). Значення констант ССВ. Правила оцінки мультиплетності.
5. Встановлення будови органічної речовини за даними елементного аналізу та спектру ЯМР
6. Обробка мас-спектра. Визначення будови сполуки за даними мас-спектра і встановленою схемою фрагментації.
7. Спільне використання фізичних методів для визначення будови молекул.

5. Технічне обладнання та/або програмне забезпечення

На заняттях буде необхідний персональний комп'ютер, загальноживані комп'ютерні програми і операційні системи, проектор, а також доступ до платформи дистанційної освіти, де розміщені матеріали курсу. Для розрахунків необхідні будуть пристрої, які дозволяють вести математичні розрахунки.

6. Система оцінювання та вимоги

6.1. Навчальні досягнення здобувачів вищої освіти за результатами вивчення курсу оцінюватимуться за шкалою, що наведена нижче:

Рейтингова шкала	Інституційна шкала
90-100	відмінно
75-89	добре
60-74	задовільно
0-59	незадовільно

6.2. Здобувачі вищої освіти можуть отримати **підсумкову оцінку** з навчальної дисципліни на підставі виконання поточних контрольних робіт. Під час поточного контролю лекційні заняття оцінюються шляхом визначення якості виконання контрольних конкретизованих завдань. Практичні заняття оцінюються якістю виконання контрольного завдання.

Якщо зміст певного виду занять підпорядковано декільком складовим опису кваліфікаційного рівня, то інтегральне значення оцінки може визначатися з урахуванням вагових коефіцієнтів, що встановлюються викладачем.

Максимальне оцінювання:

Практичні заняття		Лекційні заняття	Екзаменаційна робота (за необхідності)	Разом
При своєчасному складанні	При несвоєчасному складанні			
60	50	40	40	100

За наявності рівня результатів поточних контролів з усіх видів навчальних занять не менше 100 балів, підсумковий контроль здійснюється без участі студента шляхом визначення середньозваженого значення поточних оцінок. Крім того, кожен студент має право під час іспиту написати екзаменаційну роботу, яка містить завдання, що охоплюють ключові дисциплінарні результати навчання. Значення оцінки за виконання екзаменаційної роботи визначається середньою оцінкою складових (конкретизованих завдань) і максимально становить 40 б.

Інтегральне значення оцінки виконання контрольної роботи може визначатися з урахуванням вагових коефіцієнтів, що встановлюються кафедрою для кожної складової опису кваліфікаційного рівня НРК.

Практичні роботи приймаються шляхом перевірки виконаних розрахунків за результатами роботи та контрольними запитаннями до кожної з робіт. Під несвоєчасним складанням практичної роботи, мається на увазі складання після закінчення строків складання дисципліни, відповідно до навчального плану.

Екзаменаційна робота складається з 10 питань: 4 питання відкриті (необхідна розширена відповідь), 6 – тестові питання (1 правильна відповідь).

6.3. Критерії оцінювання підсумкової роботи

4 відкриті питання екзаменаційної роботи оцінюються у **5 балів**, **4 тестових завдання**, в яких необхідно лише вказати відповідь – **2,5 бали**, і **2 тестових завдання**, в яких необхідно вирішити задачу – **5 балів**. Таким чином, загальна максимальна оцінка може складати **40 балів**.

Виконання контрольних робіт і екзаменаційної роботи може проводитися з використанням платформи Moodle.

В разі проведення контрольної роботи в аудиторії, роботи здаються після закінчення часу, відведеного на роботу. При здачі роботи дистанційно, після завершення часу, відведеного на роботу, аркуші фотографуються або скануються та надсилаються на електронну пошту викладача впродовж зазначеного часу (2-3 хвилини). Несвоєчасно вислана робота враховується такою, що не здана.

6.4. Критерії оцінювання лекційних і лабораторних робіт

Лекційні заняття оцінюються за результатами контрольних робіт. Чотири контрольні роботи, які включають **4 відкриті питання** - оцінюються у **1,5 бали**, **2 тестових завдання**, в яких необхідно лише вказати відповідь – **0,5 бали**, і **2 тестових завдання**, в яких необхідно вирішити задачу – **1,5 бали**. Таким чином, загальна максимальна оцінка за одну контрольну роботу може складати **10 балів**.

Практичні роботи оцінюються сумарно у **60 балів**. Максимально **8 бали** за одну практичну роботу при правильному виконанні розрахунків і відповідей на питання, при несвоєчасному складанні – максимум 6 балів.

7. Політика курсу

7.1. Політика щодо академічної доброчесності

Академічна доброчесність здобувачів вищої освіти є важливою умовою для опанування результатами навчання за дисципліною і отримання підсумкової оцінки. Академічна доброчесність базується на засудженні практик списування (виконання письмових робіт із залученням зовнішніх джерел інформації, крім дозволених для використання), плагіату (відтворення опублікованих текстів інших авторів без зазначення авторства), фабрикації (вигадування даних чи фактів, що використовуються в освітньому процесі). Політика щодо академічної доброчесності регламентується положенням "Положення про систему запобігання та виявлення плагіату у Національному технічному університеті "Дніпровська політехніка". http://www.nmu.org.ua/ua/content/activity/us_documents/System_of_prevention_and_detection_of_plagiarism.pdf.

У разі порушення здобувачем вищої освіти академічної доброчесності (списування, плагіат, фабрикація), робота оцінюється незадовільно та має бути виконана повторно. При цьому викладач залишає за собою право змінити тему завдання.

7.2. Комунікаційна політика

Здобувачі вищої освіти повинні мати активовану університетську пошту.

Усі письмові запитання до викладачів стосовно курсу мають надсилатися на університетську електронну пошту.

7.3. Політика щодо перескладання

Роботи, які здаються із порушенням термінів без поважних причин оцінюються

на нижчу оцінку. Перескладання відбувається із дозволу деканату за наявності поважних причин (наприклад, лікарняний).

7.4. Політика щодо оскарження оцінювання

Якщо здобувач вищої освіти не згоден з оцінюванням його знань він може опротестувати виставлену викладачем оцінку у встановленому порядку.

7.5. Відвідування занять

Для здобувачів вищої освіти денної форми відвідування занять є обов'язковим. Поважними причинами для неявки на заняття є хвороба, участь в університетських заходах, академічна мобільність, які необхідно підтверджувати документами. Про відсутність на занятті та причини відсутності здобувач вищої освіти має повідомити викладача або особисто, або через старосту. За об'єктивних причин (наприклад, міжнародна мобільність) навчання може відбуватись в он-лайн формі за погодженням з керівником курсу.

7.6. Участь в анкетуванні

Наприкінці вивчення курсу здобувачу вищої освіти буде запропоновано анонімно заповнити електронні анкети, які буде розіслано на ваші університетські поштові скриньки. Заповнення анкет є важливою складовою вашої навчальної активності, що дозволить оцінити дієвість застосованих методів викладання та врахувати ваші пропозиції стосовно покращення змісту навчальної дисципліни «Фізичні методи дослідження в хімії».

8. Рекомендовані джерела інформації

Базові

1. Воловенко Ю. М. Ядерний магнітний резонанс / Ю. М. Воловенко, Р. Ф. Туров. – К.; Ірпінь: ВТФ «Перун», 2007. – 475 с.
2. Іщенко О.В., Гайдай С.В., Беда О.А. Мас-спектрометрія : підручник. Київ: Київський ун-т, 2018. – 244 с. – ISBN 966-933-003-1.
3. Литвин Б.Л., Романюк А.Л. Фізичні методи дослідження органічних речовин: навч. метод. посібник. – Івано-Франківськ: Прикарп. нац. ун-т. ім. В. Стефаника, 2003. – 118 с.
4. Зінчук В.К. Фізико-хімічні методи аналізу / В.К. Зінчук, Г.Д. Левицька, Л.О. Дубенська. – Львів: ЛНУ, 2008. – 362 с.
5. Іващенко О.Д. Хімія і методи дослідження сировини і матеріалів [Текст] : навчальний посібник для ВНЗ / О.Д. Іващенко, Ю.Б. Нікозять, В.І. Дмитренко – К.:Знання, 2011. - 606с.

Додаткові

6. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., Bryce D.L. Spectrometric Identification of Organic Compounds, 8th Edition. Wiley, 2014.
7. Smith R. M. Understanding Mass Spectra: a Basic Approach. -2nd Edition. Wiley, 2004. - 372 p.
8. Mitchell T.N., Costisella B. NMR – From Spectra to Structures. An Experimental Approach. Second Revised and Expanded Edition. Springer-Verlag, 2007.