



Сучасний інструментальний аналіз

неорганічних речовин

Робоча програма освітньої компоненти (Силабус)

Реквізити освітньої компоненти

Рівень вищої освіти	Другий (магістерський)
Галузь знань	16 Хімічна та біоінженерія
Спеціальність	161 Хімічні технології та інженерія
Освітня програма	Хімічні технології неорганічних, електродних матеріалів та водоочищення
Статус освітньої компоненти	Вибіркова
Форма навчання	Очна (денна, вечірня), заочна / змішана
Рік підготовки, семестр	1 курс, весняний семестр
Обсяг освітньої компоненти	8 кредитів
Семестровий контроль/контрольні заходи	Екзамен / модульна контрольна робота, ДКР
Розклад занять	Лекція 2 години на тиждень (1 пара), практичні заняття 18 годин на семестр, лабораторні заняття 2 години на тиждень (4 години один раз на два тижні) за розкладом на rozklad.kpi.ua
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: к.т.н., ст. викл. Феденко Юрій Миколайович, fedenkoyura@ukr.net Практичні заняття: к.т.н., ст. викладач Кримець Григорій Володимирович, krimets@xtf.kpi.ua Лабораторний практикум: к.т.н., ст. викладач Кримець Григорій Володимирович, krimets@xtf.kpi.ua к.т.н., ст. викладач Феденко Юрій Миколайович, fedenkoyura@ukr.net

Програма освітньої компоненти

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Після вивчення освітньої компоненти студенти зможуть використовувати отримані знання для проведення фундаментальних досліджень, висновки яких можуть бути використані як наукова основа для забезпечення науково-технічного прогресу в широкому спектрі галузей промисловості.

Предмет освітньої компоненти: Сучасний інструментальний аналіз неорганічних речовин: збирання, обробка, зберігання, поширення та відображення інформації про результати хімічних аналізів з метою зниження трудомісткості, а також підвищення якості процесів використання інформації.

Після засвоєння освітньої компоненти студенти мають продемонструвати такі результати навчання.

Метою освітньої компоненти є набуття студентами знань, вмінь, навичок, пов'язаних із використанням у майбутній професійній чи науковій діяльності різних підходів щодо аналізу

речовин органічної та неорганічної природи із застосуванням широкого спектру сучасних інноваційних методів.

Після засвоєння освітньої компоненти студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

Програмні компетентності:

- К1. Здатність генерувати нові ідеї (креативність);
- К2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях;
- К7. Здатність використовувати результати наукових досліджень і дослідно-конструкторських розробок для вдосконалення існуючих та/або розробки нових технологій і обладнання хімічних виробництв;
- К8. Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно-конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії.

Програмні результати навчання:

- ПР1. Критично осмислювати наукові концепції та сучасні теорії хімічних процесів та хімічної інженерії, застосовувати їх при проведенні наукових досліджень та створенні інновацій;
- ПР2. Здійснювати пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, аналізувати та оцінювати відповідну інформацію;
- ПР8. Застосовувати передові знання фізико-хімічних концепцій, практик та методів для вдосконалення існуючих неорганічних та електродних матеріалів, для визначення та прогнозування ключових параметрів і властивостей нових неорганічних та електродних матеріалів, в умовах лабораторії або виробництва.

2. Пререквізити та постреквізити освітньої компоненти (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Пререквізити: матеріал освітньої компоненти базується на знаннях, що отримані з курсів освітніх компонент, які викладались при здобутті ступеня бакалавра, в тому числі при підготовці бакалаврського дипломного проекту

Постреквізити освітньої компоненти: освітні компоненти (включаючи курсові та дипломні роботи і проекти), в рамках яких передбачено пошук, зберігання, обробку та аналіз інформації, одержаної за допомогою сучасних інструментальних методів хімічного аналізу, виконання інженерних розрахунків та підготовку звітів, зокрема, підготовку до оформлення і захисту магістерської дисертації.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 1. Вступ до спектрофотометрії

Основні положення. Теорія спектрів. Кількісний та якісний аналіз взаємодії матеріалу з електромагнітним випромінюванням різних довжин хвиль. Аналіз речовин у широкому діапазоні довжин хвиль випромінювання.

Тема 2. Аналіз речовин методами рентгенівської дифракції

Природа і властивості рентгенівського випромінювання. Вимоги до речовин, що можуть бути проаналізовані рентгенівськими методами аналізу. Рентгенофазовий та рентгеноструктурний аналіз. Їх спільні та відмінні риси. Сучасні прилади для рентгенофазового аналізу, основні елементи їх конструкції та принцип дії.

Тема 3. Інфрачервона спектроскопія

Теоретичні основи. Коливальні рухи атомів та молекул. Модель «гармонічного» та «ангармонічного осцилятора». Способи реєстрації та аналізу ІЧ-спектрів. Методи

приготування та відбору проб для аналізу. Якісний і кількісний аналіз. Прикладне застосування ІЧ-спектроскопії. Сучасні спектрофотометри, що працюють в ІЧ-області. Їх конструкція та принцип роботи.

Тема 4. Аналіз поруватої структури речовин

Визначення поруватості. Типи пор та їх характеристика. Класифікація речовин за їх поруватістю. Прилади для дослідження поруватої структури речовин, їх конструкція та принцип дії. Методи аналізу поруватої структури на сучасному прецизійному обладнанні та їх використання в хімічній промисловості.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова:

1. *Robinson J.W. Undergraduate Instrumental Analysis / J.W. Robinson, E.M. Skelly, G.M. Frame. – CRC Press, 2018. – 1248 p. URL: <http://www.uvm.edu/~gpetrucci/courses/Chem219/Random%20docs/Undergraduate%20Instrumental%20Analysis.pdf>*

Додаткова:

1. *Skoog D.A. Principles of Instrumental Analysis: 7th Edition / D.A. Skoog, F.J. Holler, S.R. Crouch. - Cengage Learning, 2017. – 992 p. URL: <https://www.amazon.com/Principles-Instrumental-Analysis-Douglas-Skoog/dp/1305577213>*

Інформаційні ресурси:

1. Дистанційний курс Moodle. Режим доступу: Moodle (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance).

Навчальний контент

5. Методика опанування освітньої компоненти

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з освітньої компоненти проводиться паралельно з виконанням студентами лабораторних робіт та практичних занять з розглядом питань, що виносяться на самостійну роботу. При читані лекцій застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance. Післяожної лекції рекомендується ознайомитись із матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№ з/п	Назва теми лекції та перелік основних питань
1	Основні положення. Типи та природа випромінювання.
2	Кількісний аналіз взаємодії матеріалу з електромагнітним випромінюванням.
3	Аналіз речовин у видимій та ультрафіолетовій області спектра. Сучасне обладнання для проведення спектрофотометричних методів аналізу.
4	Природа і властивості рентгенівського випромінювання.

5	<i>Вимоги до речовин, що можуть бути проаналізовані рентгенівськими методами аналізу.</i>
6	<i>Рентгенофазовий та рентгеноструктурний аналіз. Їх спільні та відмінні риси.</i>
7	<i>Сучасні прилади для рентгенофазового аналізу, основні елементи їх конструкції та принцип дії.</i>
8	<i>Модульна контрольна робота. Частина 1.</i>
9	<i>Природа IЧ-спектрів та способи їх реєстрації. Коливальні рухи атомів та молекул. Модель «гармонічного» та «ангармонічного осцилятора». Їх застосування в аналізі IЧ-спектроскопією</i>
10	<i>Методи приготування проб для аналізу IЧ-спектроскопією.</i>
11	<i>Якісний і кількісний аналіз. Прикладне застосування IЧ-спектроскопії.</i>
12	<i>Сучасні спектрофотометри, що працюють в IЧ-області.</i>
13	<i>Визначення поруватості. Типи пор та їх характеристика</i>
14	<i>Класифікація речовин за їх поруватістю.</i>
15	<i>Прилади для дослідження поруватої структури речовин, їх конструкція та принцип дії.</i>
16	<i>Новітні тенденції у конструкціях приладів для визначення поруватої структури твердих речовин.</i>
17	<i>Методи аналізу поруватої структури та їх використання в хімічній промисловості.</i>
18	<i>Модульна контрольна робота. Частина 2</i>

Практичні заняття

Основною метою практичних занять з освітньої компоненти є навчання студентів використовувати теоретичні знання, набуті на лекціях і при самостійній роботі, для вирішення конкретних практичних завдань з фахового напрямку, набуття студентами вмінь і навичок проведення технологічних і проектно-конструкторських розрахунків з фаху. При цьому одночасно ставиться за мету поглиблення теоретичних знань при усвідомленні студентами методики застосування цих знань для розрахункового обґрунтування реальних рішень з фахової діяльності.

№ з/п	Назва теми заняття та перелік основних питань
1-2	<i>Рішення задач із спектрофотометричних методів аналізу</i>
3-4	<i>Розшифрування рентгенівських дифрактограм. Розрахунок параметрів кристалічних граток. Застосування формули Шерера</i>
5	<i>Аналіз готових IЧ-спектрів за допомогою довідкової літератури</i>
6-8	<i>Комп'ютерне моделювання структури молекул за допомогою програми «HyperChem»</i>
9	<i>Типи поруватості. Вирішення задач на визначення поруватості</i>

6. Лабораторні заняття

Основні завдання циклу лабораторних занять з освітньої компоненти “Сучасний інструментальний аналіз неорганічних речовин” націлені на оволодіння спеціальною технікою хімічних лабораторних процедур, включаючи вибір методу аналізу, найбільш доцільного у даних обставинах, підготовування досліджуваного зразка до проведення аналізу, проведення

самостійних вимірювань на відповідному устаткуванні, розшифровування інформації, одержуваної в ході визначень (хроматографи, рентгенограми, ІЧ-спектри, дериваторами, електронні спектри та ін.), проведення якісного і кількісного аналізу речовин, виконання вихідних та кінцевих розрахунків з застосуванням статистичної обробки результатів аналізу.

№ з/п	Назва лабораторної роботи
1	Вступне заняття. Техніка безпеки. Особливості проведення лабораторних робіт. Правила і вимоги до оформлення протоколів. Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
2	Аналіз речовин спектрофотометричним методом із застосуванням спектрофотометра фірми «Shimadzu» Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
3	Аналіз і розшифрування рентгенівських дифрактограм Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
4	Рентгеноструктурний аналіз речовин із застосуванням формули Шерера Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
5	Розшифрування готових рентгенівських дифрактограм Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
6	Визначення пористості зразків твердих речовин Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
7	Характеризація твердих речовин за їх поруватістю Завдання на СРС: оформити протокол експериментальної частини наступної лабораторної роботи та підготуватися до допуску за теоретичною та експериментальною частинами.
8	Підсумкове заняття

7. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на практичних заняттях, оформлення звітів з лабораторних робіт, виконання розрахункової роботи, підготовка до захисту лабораторних робіт, практичних завдань та розрахункової роботи, підготовка до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС	Кількість годин на підготовку
Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення	50 годин

<i>розрахунків на практичних заняттях, оформлення звітів з лабораторних робіт</i>	
<i>Виконання домашньої контрольної роботи</i>	<i>50 годин</i>
<i>Підготовка до МКР</i>	<i>20 годин</i>
<i>Підготовка до екзамену</i>	<i>30 годин</i>

8. Домашня контрольна робота

Метою домашньої контрольної роботи є стимулювання студентів до самостійного осмислення теоретичного і фактичного матеріалу, самостійного виконання розрахунків, вдосконалення вміння пошуку та аналізу інформації з програмного матеріалу (в т. ч. з використанням мережі Internet), що максимально наближений до реальних дослідницьких проблем.

Виконання домашньої контрольної роботи згідно індивідуального завдання сприятиме засвоєнню і поглибленню вивченю освітньої компоненти “Сучасний інструментальний аналіз неорганічних речовин”.

Домашня контрольна робота вміщує наступні теми:

- спектрофотометричні методи аналізу;
- аналітичні методи рентгенівської дифракції;
- аналіз молекулярної структури речовин методом ІЧ-спектроскопії;
- розрахунок поруватості твердих речовин.

Політика та контроль

8. Політика освітньої компоненти

У звичайному режимі роботи університету лекції, практичні заняття та лабораторні роботи проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні та практичні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання «Сікорський», лабораторні роботи в лабораторії кафедри. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання «Сікорський». Відвідування лекцій, практичних та лабораторних занять є обов'язковим.

На початку кожної лекції проводиться усний бліц-контроль за матеріалами попередньої лекції у вигляді тестування із застосуванням платформи Moodle.

Правила захисту лабораторних робіт:

1. До захисту допускаються студенти, які виконали розрахунки у відведений час із достатнім ступенем достовірності.
2. Після захисту викладачем виставляється підсумкова оцінка із захисту лабораторної роботи.
3. Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини тягнуть за собою штрафні бали

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. Використання розрахункових або дослідних матеріалів інших студентів і подання їх за свої штрафуються до 5 балів;
2. Несвоєчасне виконання практичного завдання або лабораторної роботи без поважної причини штрафується 2 балами;
3. Несвоєчасний захист роботи без поважної причини штрафуються 2 балами;
4. За слушні поради щодо вдосконалення робіт нараховується від до 5 заохочувальних балів;

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної добродетелі: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

9. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: опитування на лекціях, роботу на практичних заняттях, МКР, захист домашньої контрольної роботи (ДКР).
2. Семестровий контроль: екзамен.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

Рейтинг студента складається з балів, що він отримує за:

- 1) відповіді на лекціях;
- 2) виконання 6 лабораторних робіт;
- 3) роботу на практичних заняттях (5 заняття);
- 4) модульну контрольну роботу (две частини);
- 5) домашню контрольну роботу;
- 6) проходження тестування (екзамен).

1. Опитування на лекціях:

Максимальна кількість балів дорівнює 10. Враховується повна і вичерпно вірна відповідь на запитання лектора.

Критерії оцінювання:

2 бали «відмінно»: повна і вичерпно вірна відповідь на запитання лектора;

1,5 бали «добре» : неповна, з непринциповими помилками відповідь або після деякої (не дуже значної) навідної допомоги відповідь на запитання лектора;

1 бал «задовільно»: неповна відповідь або відповідь з велими принциповими помилками;

0 балів «незадовільно»: неспроможність студента сформулювати вірну відповідь навіть при наявній допомозі лектора чи іншого студента.

2. Робота під час лабораторних занять:

Ваговий бал 5. Максимальна кількість балів на усіх лабораторних заняттях дорівнює: 5 балів · 6 = 30 балів.

Критерії оцінювання:

4-5 балів «відмінно»: охайно оформлений протокол лабораторної роботи з чіткими результатами експерименту та висновками, безпомилкові відповіді на контрольні запитання до лабораторної роботи;

3-4 бали «добре» : наявність протоколу з незначними недоліками, вірні в цілому відповіді на контрольні запитання з незначними неточностями;

1-2,9 балів «задовільно»: вірні відповіді на контрольні запитання після навідної допомоги викладача або неповністю оформленій протокол (нечіткі висновки, відсутність деяких розрахунків), який підлягає доповненню;

0 балів «незадовільно»: відповіді на завдання викладача з помилками принципового характеру.

3. Робота на практичних заняттях:

Ваговий бал 4. Максимальна кількість балів на усіх практичних заняттях дорівнює: 4 бали · 5 = 20 балів.

3-4 бали «відмінно»: безпомилкове виконання розрахунку під час поточного заняття, виконана домашня робота;

2-2,9 балів «добре»: вірне в цілому рішення з незначними похибками окремих елементів розрахунку або виконання вірного розрахунку після навідної допомоги викладача або проведення розрахунку зі значущими помилками, які підлягають виправленню, виконана домашня робота;

1-1,9 балів «задовільно»: неповне виконання завдання викладача або проведення розрахунку з грубими помилками, що не підлягають виправленню, а потребують переробки завдання, виконана домашня робота

0 балів «незадовільно» виконання завдання викладача з помилками принципового характеру або не виконана домашня робота, або відсутність на занятті.

4. Виконання модульної контрольної роботи (МКР)

Ваговий бал – 10.

Критерії оцінювання (МКР):

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 10 балів;
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними помилками – 8 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 6 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь (не відповідає вимогам на «задовільно») – 0 балів.

5. Домашня контрольна робота

Ваговий бал – 10. Домашня контрольна робота – реферат із пошуком інформації в наукових джерелах.

Критерії оцінювання:

8–10 балів «відмінно»: безпомилкове виконання та оформлення реферату;

5–7 балів «добре»: незначні недоліки в оформленні;

3–4 бали «задовільно»: оформлення після навідної допомоги викладача або зі значущими помилками, які підлягають виправленню;

0 балів «незадовільно»: неповне або відсутнє виконання.

Штрафні бали (Rs) за :

- використання розрахункових або дослідних матеріалів інших студентів і подання їх за свої – 5 балів за кожне завдання;
- запізнення (до 30 хв.) на заняття без поважних причин – 1 бал;
- несвоєчасне (пізніше, ніж на тиждень) подання до захисту розрахункової роботи – 1 бал за кожен день запізнення;
- відсутність на модульній контрольній роботі без поважної причини – 10 балів.

Розрахунок шкали рейтингової оцінки з освітньої компоненти (RD):

Сума вагових балів контрольних заходів (Rc) протягом семестру складає: 80 балів.

Сума штрафних балів (Rs) не повинна перевищувати, як правило, 0,1Rc (себто 5 балів).

Екзаменаційна складова (Re) шкали дорівнює 25 % від RD.

Таким чином, рейтингова шкала з освітньої компоненти складає:

$$RD = Rc + Re = 80 + 20 = 100 \text{ балів}$$

Необхідними умовами допуску до екзамену є виконання всіх лабораторних робіт, ДКР, МКР, а також стартовий рейтинг (rc) не мене 50% від Rc, себто 25 балів. Таким чином, студенти, які набрали протягом семестру рейтинг вищий або рівний за 0,5 RC (>25 балів), допускаються до екзамену.

На екзамені студенти виконують тестування. Максимальна оцінка за тест – 20 балів. Тест містить 50 запитань, кожне з яких оцінюється у 0,4 бали. На тест відводиться 45 хвилин.

Сума стартових балів та балів за екзаменаційну контрольну роботу переводиться до екзаменаційної оцінки згідно з таблицею.

Таблиця – Переведення рейтингових балів до оцінок за університетською шкалою

<i>Кількість балів</i>	<i>Оцінка</i>
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

10. Додаткова інформація з освітньої компоненти

- Вимоги до оформлення домашньої контрольної роботи, перелік запитань до МКР та екзамену наведені в Електронному Кампусі КПІ.*

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено:

старшим викладачем кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології, к.т.н. Феденком Ю.М.

Ухвалено кафедрою технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології
(протокол №22 від 29.06.2022р.)1

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол №10 від 23.06.2022р.)