

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
Хімічний факультет

Кафедра аналітичної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
навчальної роботи

В.О. Павленко

_____ 20__ року

«___» _____ 20__ року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ
СУЧАСНИМИ МЕТОДАМИ

для студентів

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

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019/2020**
Семестр **II**
Кількість кредитів ECTS **5**
Мова викладання, навчання та оцінювання
українська
Форма заключного контролю **іспит**

Викладач: доцент, к.х.н, доц. **Зінько Ліонель Степанівна**

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


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

КИЇВ – 2019

Розробники: *доктор хімічних наук, професор Запорожець Ольга Антонівна*
кандидат хімічних наук, доцент Зінько Ліонель Степанівна

ЗАТВЕРДЖЕНО

В.о.зав. кафедри аналітичної хімії


_____ (підпис) (О.Ю.Гананайко)
(прізвище та ініціали)

Протокол №6 від “9” квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від “8” травня 2019 року

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

ВСТУП

1. Мета дисципліни – в ознайомленні студентів із сучасними експериментальними й теоретичними методами визначення складу та стійкості комплексних сполук різних типів, а також способами математичної, зокрема комп'ютерної, обробки експериментальних результатів дослідження багатокомпонентних систем, де відбувається процес комплексоутворення.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи неорганічної, органічної та фізичної хімії, хімічних та інструментальних методів кількісного аналізу, методів молекулярної спектроскопії та електрохімічних методів аналізу

2. Вміти проводити хімічний експеримент за протоколом, здійснювати вимірювання та спектрофотометрі, фотоелектроколориметрі, рН-метричне титрування; титрування з іон-селективним електродом; вміти побудувати діаграми рівноваг у розчині.

3. Володіти навиками математичної обробки інформації з використанням комп'ютерної техніки та програм Excel, Origin; методами статистичної обробки експериментальних результатів.

3. Анотація навчальної дисципліни В результаті вивчення дисципліни студенти отримують теоретичні знання та практичні навички, необхідні для експериментального визначення складу та констант стійкості комплексних сполук.

4. Завдання (навчальні цілі) –

- Навчитися планувати та організувати хімічний експеримент, що дозволяє встановити наявність/відсутність комплексоутворення в розчині; обирати метод встановлення складу та стійкості комплексу за результатами попередніх досліджень;

- Навчитися реалізувати проведення хімічного експерименту та його обробки із застосуванням відповідного програмного забезпечення з метою встановлення складу та стійкості комплексних сполук

- Оволодіти навиками формулювання висновків за результатами своїх досліджень із залученням даних літератури та презентувати отримані експериментальні та розрахункові результати досліджень багатокомпонентних систем у присутності цільової аудиторії.

5. Результати навчання за дисципліною:

<i>Результат навчання</i> (1.знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Особливості проведення експерименту (з обов'язковим дотриманням техніки безпеки) в хімічній лабораторії при дослідженні процесів комплексоутворення в розчині; методи постановки хімічного експерименту при дослідженні комплексів	лекції, лабораторні самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5

* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

1.2	Особливості та типи реакцій комплексоутворення в розчині;	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.3	Основи методів попередніх досліджень,; методів визначення ядерності комплексів та складу комплексних сполук залежно від стійкості	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	25
1.4	Основи методів розрахунку констант стійкості комплексів у розчині залежно від стійкості;	лекції, лабораторні, самостійні		
1.5	Основи комп'ютерних методів обробки експериментальних даних : Excel, Origin, Clinp, HyperChem, CS ChemDraw, CS Chem3D;	лекції, лабораторні, самостійні		
2.1	Знайти у першоджерелах інформацію про комплексоутворюючі властивості ліганда та комплексоутворюючу здатність центрального атома	лекції, практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2	Планувати та організувати хімічний експеримент, що дозволяє встановити наявність/відсутність комплексоутворення в розчині; обрати метод встановлення складу та стійкості комплексу за результатами попередніх досліджень;	лекції, практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3	Вміти фіксувати, інтерпретувати та відтворити результати експерименту; реалізувати процедуру проведення спеціалізованого хімічного експерименту та його обробки з метою встановлення складу та стійкості комплексних сполук	лекції, практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.4	Проводити обробку експериментально отриманих результатів із застосуванням відповідного програмного забезпечення; проводити статистичну обробку результатів вимірювань та розрахунків			
2.5	Формулювати висновки за результатами своїх досліджень із залученням даних літератури;			
2.6	Презентувати отримані експериментальні та розрахункові результати в присутності цільової аудиторії.			

3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, що стосується комплексоутворення	лекції, практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
4.1	Вміти самостійно спланувати, провести спеціалізований експеримент, обробити результати, інтерпритувати їх та проаналізувати з використанням даних літератури	практичні, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі аналітичної	самостійні	ПтК-3, ПсК	5

*Поточний контроль (активність під час практичних ПтК-1 і лабораторних робіт ПтК-2 та контроль самостійної роботи ПтК-3), підсумковий контроль ПсК

-

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

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	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 незнайомої 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 нефакхівців.						+	+	+	+	+	

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
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.				+		+	+	+	+	+	
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.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	

Система контролю знань та умови складання іспиту. Спеціальна дисципліна **Дослідження комплексоутворення сучасними методами** оцінюється за модульно-рейтинговою системою. Вона складається з **3** модулів.

Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за 100-бальною шкалою.

Модульний контроль включає **3** змістові модулі і комплексний підсумковий модуль (**іспит**).

Загалом за семестр: 3 модульні контрольні роботи, 2 презентації результатів роботи, 8 лабораторних робіт.

Змістовий модуль 1 (7 лекцій)

Максимальна кількість балів – **100**. Передбачається проведення зі студентами **2-х** лабораторних занять, написання **1** модульної контрольної роботи на тему «**Попередні дослідження рівноваг у розчині**», виконання 3-х самостійних робіт з питань «Основні типи реакцій комплексоутворення та номенклатура комплексних сполук, графічні методи та розрахункові методи визначення кількості часток у розчині за рангом матриці, визначення заряду комплексних сполук, написання домашньої самостійної роботи на тему: «Побудова моделі комплексоутворення та вибір експериментального методу дослідження заданої системи» та презентування отриманих результатів.

Виконання кожної лабораторної роботи оцінюється в **20** балів,
написання модульної роботи – **100** балів,
самостійна робота – **10** балів,
презентування отриманих результатів – **10** балів.

Оцінка за лабораторну роботу включає в себе:

- оцінку за теоретичну підготовку (усне або письмове опитування): **1 – 5** балів;
- експериментальні результати **1 – 5** балів;
- обробка експериментальних результатів **1 – 5** балів

- аналіз отриманих результатів (обговорення і висновки): **1 – 5 балів**;

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовий модуль 1:

100 (модульна контрольна робота)×**0,4** + **40** (лабораторні роботи) + **10** (самостійна робота) + **10** (презентація) = **100** балів.

Змістовий модуль 2 (лекцій 3)

Максимальна кількість балів – **100** балів. Передбачається проведення зі студентами **4-х** лабораторних занять, написання **2-х** самостійних робіт на тему Розрахування складу комплексної сполуки із застосуванням методу Старіка і Барбанелля, обробка результатів, отриманих методом Асмуса із застосуванням програми Clinp, презентація результатів досліджень та написання модульної контрольної роботи з теми «**Визначення складу та стійкості комплексів у випадку утворення у розчині однієї комплексної сполуки**».

Виконання кожної лабораторної роботи – **20** балів,
модульної контрольної роботи – **100** балів,
самостійна робота – **10** балів,
презентація отриманих результатів – **10** балів.

Оцінка за лабораторну роботу включає в себе:

- оцінку за теоретичну підготовку (усне або письмове опитування): **1 -5** балів ;
- експериментальні результати **1 – 5** балів;
- обробка експериментальних результатів **1 – 5** балів
- аналіз отриманих результатів (обговорення і висновки): **1 – 5** балів;

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовий модуль 2:

100 (модульна контрольна робота)×**0,4** + **80** (лабораторні роботи) + **10** (самостійна робота) + **10** (презентація) = **100** балів.

Змістовий модуль 3 (лекцій 5)

Максимальна кількість балів – **100**. Передбачається проведення зі студентами **2-х** лабораторних занять, написання **1** модульної контрольної роботи з теми «**Методи дослідження ступінчастого комплексоутворення та утворення різнолігандних комплексів**», **4-х** самостійних робіт: комп'ютерна (програми Clinp, HyperChem, SuperChem) обробка результатів потенціометричного титрування за методом Б'єррума, обробка результатів потенціометричного титрування за методом Ледена, застосування методу Назаренка В.А. для визначення константи копропорціювання різнолігандних комплексів, розрахункові задачі (побудова діаграм рівноваг комплексоутворення у розчині)

Виконання кожної лабораторної роботи – **20** балів,
написання модульної контрольної роботи – **100** балів,
самостійна робота – **5** балів (усього **20** балів)

Оцінка за лабораторну роботу (див. модуль 2).

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовий модуль 3:

100 (модульна контрольна робота)×**0,4** + **40** (лабораторні роботи) + **20** (самостійна робота) = **100** балів.

Розрахунок підсумкової оцінки в балах

За результатами семестру студент отримує підсумкову оцінку за 100-бальною системою, яка розраховується як середньозважене оцінок за кожен з чотирьох модулів у семестрі та оцінки за іспит за наступною формулою:

$$ПО = k_1 \cdot ЗМ1 + k_2 \cdot ЗМ2 + k_3 \cdot ЗМ3 + k_{КПМ} \cdot КПМ$$

Модульні коефіцієнти наведено у табл. 1.

Таблиця 1

Розрахунок модульних оцінок

	Змістовий модуль 1 (ЗМ1)	Змістовий модуль 2 (ЗМ2)	Змістовий модуль 3 (ЗМ3)	Комплексний підсумковий модуль (КПМ)	Підсумкова оцінка (ПО)
Вагові коефіцієнти (%)	20% $k_1=0,20$	20% $k_2=0,20$	20% $k_3=0,20$	20 % $k_{КПМ}=0,20$	100 %
Максимальна оцінка за модуль в балах	100	100	100	100	100
Максимальна оцінка в підсумкових балах	20	20	20	40	100

Підсумковий контроль знань студента проводиться у формі письмового екзамену, під час якого може бути отримана максимальна кількість **балів - 40**.

Підсумкова семестрова рейтингова оцінка складається з семестрової модульної та екзаменаційної оцінок і дорівнює **100 балам**.

Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

*Якщо за результатами модульно-рейтингового контролю студент отримав за три змістові модулі сумарну оцінку менше ніж 36 балів (підсумкових) і **не виконав хоча б одну лабораторну роботу**, то він/вона не допускається до іспиту і вважається таким, який не виконав усі види робіт, які передбачаються навчальним планом на семестр з дисципліни "Дослідження комплексоутворення сучасними методами".*

За невчасно оформлені лабораторні роботи бали нараховуються за рівнянням: $y=a-5b$, де а-оцінка за роботу, b - кількість тижнів, що минули після зазначеного терміну.

**8. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛІНИ
НАВЧАЛЬНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№ те ми	НАЗВА ТЕМИ	Кількість годин		
		Лек ції	Ла б	Сам ості
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1. «Попередні дослідження рівноваг у розчині»				
1	Мета та задачі спецкурсу. Методологічні підходи до встановлення складу, будови та стійкості комплексних сполук (КС). Основні поняття (комплексна сполука, центральний атом (ц.а.), внутрішня та зовнішня координаційна сфера, природа зв'язку у метал - ліганд, сучасна українська та міжнародна номенклатури КС).	2		
2	Основні типи реакцій комплексоутворення залежно від природи ліганду та центрального атома (зокрема дентатності, заряду та значення координаційного числа ц.а.) та способу координації. Сольватоконплеси. Кінетично інертні та лабільні комплексні сполуки.	2		10
3	Кількісні характеристики реакцій комплексоутворення у розчині. Константи стійкості комплексних сполук (концентраційні, термодинамічні, стійкості та утворення), їх критична оцінка. Максимальне та мінімальне значення константи стійкості з точки зору термодинаміки: для випадку першої ступінчастої константи стійкості комплексної сполуки металу із монодентатним лігандом.	2		
4	Сучасні підходи до класифікації методів дослідження (критерії, їх критична оцінка, методологія дослідження комплексоутворення у розчині). Попередні дослідження: встановлення факту комплексоутворення у розчині (можливі зміни у спектрах у випадку забарвлених комплексних сполук), визначення кількості комплексних часток у розчині (метод ізобестичної точки).	2	2	
5	Визначення кількості комплексних часток у розчині (графічні методи для кількості забарвлених комплексних часток ≤ 3 , розрахункові методи, що базуються на визначення рангу матриці). Встановлення наявності ступінчастого комплексоутворення.	2	2	10
6	Визначення ядерності комплексних сполук методом Б'єррума та методом, придатним для визначення константи стійкості моноядерного комплексу. Визначення заряду комплексних сполук.	2		20
7	Метод ізомолярних серій як метод попередніх досліджень. Побудова моделі комплексоутворення, її експериментальна перевірка та вибір експериментального методу визначення складу та стійкості комплексної сполуки.	2	2	20
Модульна контрольна робота 1		2		
Всього за модуль 1		16	6	60
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2. « Визначення складу та стійкості комплексів у випадку утворення у розчині однієї комплексної сполуки»				
8	Класифікація методів дослідження за стійкістю комплексних сполук. Якісна оцінка стійкості комплексних сполук методом ізомолярних серій. Визначення складу стійкого моно ядерного комплексу методом молярних відношень. Визначення константи стійкості методом Комаря.	2	2	
9	Методи дослідження складу та стійкості комплексів середньої стійкості (ізомолярних серій, Гарвея-Меннінга, Моланда, Старіка і Барбанелля, Бента і Френча, розбавлення А.К. Бабка. та малої стійкості (метод ізомолярних серій, зсуву рівноваги).	2	4	20

10	Методи дослідження складу та стійкості комплексів малої стійкості (метод Асмуса, за двома точками діаграми зсуву рівноваги, метод розбавлення).	2	2	20
Модульна контрольна робота 2			2	
Всього за модуль 2		6	8	40
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 3. «Методи дослідження ступінчастого комплексоутворення та утворення різнолігандних комплексів»				
11	Методи дослідження ступінчастого комплексоутворення. Класифікація методів за способом математичної обробки експериментальних результатів: методи Б'єррума, Ледена, К.Б. Яцимирського. Характеристика комплексоутворення у розчині із застосуванням функцій утворення та закомплексованості (Фронеуса). Методи визначення констант утворення та ступінчастих констант стійкості.	2	2	2
12	Метод відповідних розчині Б'єррума, потенціометричні варіанти методів Б'єррума та Ледена	2	2	10
13	Метал-індикаторний метод: визначення констант стійкості комплексних сполук найпростішого складу у ряду: однакові центральні атоми - різні ліганди, або різні центральні атоми - один ліганд.			20
14	Методи дослідження різнолігандних комплексних сполук. Метод Назаренка В.А. Поняття про мікроконстанту	2		10
15	Побудова діаграм рівноваг у розчині комплексних сполук. Приклади застосування відомостей щодо складу та стійкості комплексних сполук в аналітичній практиці . Проміжна контрольна робота			8
Модульна контрольна робота 3		2		
Всього за модуль 3		8	4	50
Всього		30	20	150

Загальний обсяг **150** год.

Лекції – **30** год.

Лабораторні – **20** год.

Самостійна робота - **150** год.

9. СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

9.1. Основна:

1. Бабко А.К. Физико-химический анализ комплексных соединений в растворах. Киев: Изд-во АН УССР, 1955
2. Шлефер Г.Л. Комплексообразование в растворах. М.-Л.: Химия, 1964
- 3. Россоти Ф., Россоти Х. Определение констант устойчивости и других констант равновесия в растворах. М.: Мир, 1965**
4. Бабко А.К., Штокало М.Й. Метал-индикаторный метод изучения комплексов в растворе. Киев: Наукова думка, 1969
5. Бек М. Химия равновесий реакций комплексообразования. М.: Мир, 1973
- 6. Бек М., Надьпал И. Исследование комплексообразования новейшими методами. М.: Мир, 1989**
7. Хартли Ф., Бергес К., Оллок Р. Равновесия в растворах. М.: Мир, 1983
8. Скопенко В.В., Григорьева В.В. Координационная химия. Практикум. Київ: Вища школа, 1984
9. Скопенко В.В., Савранський Л.І. Координаційна хімія, Київ: Київ.ун-т, 1992
10. Булатов М.И., Калинин И.П. Практическое руководство по фотометрическим методам анализа. Л.: Химия, 1986
11. Пилипенко А.Т., Тананайко М.М. Разнолигандные и разнометальные комплексы и их применение в аналитической химии. М.: Химия, 1983
12. Пятницкий И.В., Франковский В.А. Физико-химический анализ комплексных соединений в растворах. (Конспект лекций). Киев: 1978
13. Те же авторы. Методы определения состава и устойчивости бинарных и разнолигандных комплексных соединений в растворах. (Текст лекций) Киев: 1980.
14. Запорожець О.А. Лабораторні роботи до спецпрактикуму “Дослідження комплексоутворення у розчині та комп’ютерна обробка результатів” Київ: ВПЦ “Тираж”. 2005, 47 с.
15. Голуб О.А. Українська номенклатура в неорганічній хімії. Київ: Київ.ун-т, 1992

9.2. Додаткова

1. Яцимирский К.Б., Васильев В.П. Константы нестойкости комплексных соединений. М.: Изд-во АН СССР, 1959
2. Лурье Ю.Ю. Справочник по аналитической химии. М.: Химия, 1989
3. Stability constants of metal-ion complexes/ Part A/ Inorganic ligands/ Compiled by E. Hogfeld. - JUPAC Chemical Data Series, N21. Ох.-Н.У.-Т.-С.-Р.-Ф, Pergamon Press, 1982
4. Stability constants of metal-ion complexes/ Part B/ Organic ligands/ Compiled by D.D. Perrin. - JUPAC Chemical Data Series, N21. Ох.-Н.У.-Т.-С.-Р.-Ф, Pergamon Press,
5. Critical stability constants. Part 2. Amine / Smith R.M., Martell A.E. , N.-Y., Plenum, 1975.
6. Critical stability constants. Part 3. Other organic ligands / Smith R.M., Martell A.E. , N.-Y., 1978.
6. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнезёмов: содержательные модели, математические методы и приложения. - Харьков: Фолио, 2000. - 288 с.