

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора
з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

«___» _____ 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізичні методи дослідження в хімії

(повна назва навчальної дисципліни)

галузь знань 10 Природничі науки
15(шифр і назва)

спеціальність 102 Хімія
2016 152(шифр і назва спеціальності)

освітній рівень бакалавр
(бакалавр, магістр)

освітньо-наукова програма хімія
152 (назва освітньої програми)

спеціалізація високі технології
(назва спеціалізації)

вид дисципліни **базова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>I, II</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладачі: д.х.н., проф. Комаров І.В., д.х.н., проф. Іщенко О.О.

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробники: д.х.н., проф. Комаров І.В., д.х.н., проф. Іщенко О.О.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри Рябухін С.В.

_____)

(підпис, прізвище та ініціали)

Протокол № ___ від «___» _____ 2022 року

Схвалено науково-методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол № ___ від «___» _____ 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____ ()
(підпис, прізвище та ініціали)

1. Мета дисципліни:

Засвоєння студентами основних теоретичних положень методів ЯМР, ІЧ, ЕПР, Раманівської, електронної, мікрохвильової спектроскопії і мас спектрометрії, поверхневого плазмонного резонансу; одержання практичних навичок з інтерпретації експериментальних даних відповідних методів і їх використанню для встановлення складу і будови хімічних сполук, зокрема, біомолекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот) та наноматеріалів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

Основи фізики, біології, загальної, неорганічної та органічної хімії.

Студент повинен вміти:

Користуватися сучасними електронними Інтернет-ресурсами, що є у відкритому доступу, зокрема, довідковими даними, що стосуються фізичних методів дослідження хімічних сполук.

3. Анотація навчальної дисципліни

Навчальна дисципліна присвячена вивченню методів дослідження хімічних сполук, що базуються на фізичних явищах. Ці методи сьогодні є невід'ємною частиною сучасної науки та високих технологій. Вони широко використовуються для встановлення складу і будови хімічних сполук, матеріалів. Цьому сприяє поява нової сучасної апаратури і комп'ютерних методів обробки спектрів, що значно розширює можливості спектральних методів. Особлива увага приділяється засвоєнню студентами практичних навичок з інтерпретації експериментальних даних, та плануванню експериментальних досліджень виходячи з конкретних завдань. Протягом курсу в контексті досліджень біомолекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот) та наноматеріалів наводяться типові алгоритми досліджень їх складу і будови.

4. Завдання (навчальні цілі)

Сформувати у студентів ґрунтовні знання з фізичних методів дослідження хімічних сполук, навички інтерпретації спектральних даних з метою встановлення складу і будови хімічних сполук, зокрема, біомолекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот) та наноматеріалів.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	<p>Знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - фізичну суть мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, ЕПР, мікрохвильової, електронної, Раманівської спектроскопій та поверхневого плазмонного резонансу; - основні спектральні параметри та їх зв'язок зі складом та будовою речовин, що досліджуються; - основні типи задач, які можна розв'язувати за допомогою методів, що розглядаються в курсі; - способи приготування зразків для досліджень, експериментальні умови з'йомки спектрів. 	<p><i>Лекції</i></p> <p> </p> <p><i>Відео, екскурсії в дослідницькі лабораторії</i></p>	<i>Контрольні роботи</i>	35%
2.	<p>Вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - інтерпретувати експериментальні дані мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, ЕПР, мікрохвильової, електронної, Раманівської спектроскопій та поверхневого плазмонного резонансу, якщо вони отримані для відомих сполук; - визначати склад і будову невідомих сполук за даними мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, ЕПР, мікрохвильової, електронної, Раманівської спектроскопій та поверхневого плазмонного резонансу, користуючись довідниками, у тому числі, Інтернет-ресурсами. 	<p><i>Практичні заняття</i></p> <p> </p> <p><i>Практичні заняття</i></p>	<p><i>Контрольні роботи</i></p> <p> </p> <p><i>Контрольні роботи</i></p>	<p>30%</p> <p> </p> <p>15%</p>
3.	<p><i>Вміти працювати в групі на практичних роботах</i></p>	<i>Практичні заняття</i>	<i>Звіти</i>	10%

4.	<i>Вміти самостійно працювати з навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.</i>	<i>Самостійна робота</i>	<i>Контрольна робота</i>	<i>10%</i>
----	---	--------------------------	--------------------------	------------

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
3. Практичні та семінари– РН 2., 3.– 12 балів/ 7 балів
4. Проміжне тестування РН 4. – 8 балів/ 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних завдань. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 20 балів

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. **Проміжне тестування** проводиться упродовж лекційного курсу. **Звіти у формі опитування** проводяться після кожного практичного заняття. **Оцінювання роботи студентів з рішення задач** проводиться на практичних заняттях у формі контрольної роботи.

7.3 Шкала відповідності оцінок

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

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та практичних занять

Номер і назва теми*	Кількість годин		
	лекції	практичні заняття	Само-стійна робота
Розділ 1			
Тема 1. Поняття про фізичні методи дослідження, основні терміни, класифікація методів, їх загальний огляд. (Спектроскопічні, дифракційні методи дослідження, та методи, що базуються на перетворенні речовин, що досліджуються, в йони. Діапазони частот (довжин хвиль) для різних спектроскопічних методів дослідження (гама-резонансної спектроскопії, рентгенівській, фотоелектронній, електронній, коливальній, обертальній спектроскопії, методах ЕПР, ЯМР та ЯКР). Прямі та обернені спектральні задачі. Характеристичний час фізичних методів дослідження. Значення фізичних методів для теорії та практики хімії, сучасний стан в даній галузі та перспективи її розвитку.)	2		
Тема 2. Основні принципи мас-спектрометрії. (Одиниці виміру і форми представлення мас-спектрів. Принципова блок-схема мас-спектрометра. Йонізація в мас-спектрометрії електронним ударом (ЕУ). Основні процеси, що відбуваються при ЕУ. Хімічна йонізація та області її аналітичного застосування. Методи йонізації лабільних молекул (польова йонізація, польова десорбція, FAB, електроспрей-йонізація) та їх порівняння з методом ЕУ. Основні методи аналізу йонів – магнітний, часопротітний, квадрупольний. Роздільна здатність мас-спектрометра. Мас-спектроскопія високої роздільної здатності. Типи йонів у мас-спектрі: молекулярний йон, уламкові йони, перегруповані, метастабільні, двозарядні та ізотопні йони.)	2		
Тема 3. Застосування мас-спектрометрії для визначення складу і будови хімічних сполук (1 частина). (Визначення брутто-формули, виходячи з даних мас-спектрометрії: за допомогою точного значення маси молекулярного йону. Основні правила розшифрування мас-спектрів (азотне правило, правила фрагментації йонів). Характеристичні йони та характерні фрагментації (на прикладі основних класів органічних сполук – вуглеводнів, галогенпохідних вуглеводнів, спиртів.)	2		4

<p>Тема 4. Застосування мас-спектрометрії для визначення складу і будови хімічних сполук (2 частина). (Характеристичні йони та характерні фрагментації (на прикладі основних класів органічних сполук – етерів, альдегідів, кетонів, карбонових кислот, нітрилів, естерів, амінів, гетероциклічних сполук). Найбільш характеристичні фрагментації молекулярних йонів з відщепленням нейтральних частинок. Характеристичні перегрупування йонів. Перегрупування Мак-Лаферті.)</p>	2		
<p>Практичне заняття 1. Технічні аспекти зйомки мас-спектрів, принципи їх інтерпретації. Розв'язання задач.</p>		4	8
<p>Розділ 2</p>			
<p>Тема 5. Фізичні явища, що лежать в основі ЯМР. Основні принципи методу. (Характеристика магнітних ядер (спін, магнітний момент, гіромагнітне відношення). Взаємодія магнітних моментів ядер з магнітним полем. Ядерна прецесія. Моделі, що використовуються для ілюстрації поведінки магнітних ядер в постійному магнітному полі. Поняття про когерентність. Макроскопічна ядерна намагніченість, залежність від температури та напруженості зовнішнього магнітного поля. Спін-граткова і спін-спінова релаксація, час релаксації. Розподілення ядер між рівнями енергії в зовнішньому магнітному полі (розподілення Больцмана). Умови ядерного магнітного резонансу. Основне рівняння ЯМР, форма сигналу ЯМР.)</p>	2		
<p>Тема 6. Блок-схема ЯМР спектрометра. Поняття про Фур'є ЯМР-спектроскопію. Технічні аспекти з'йомки спектрів ЯМР. (Способи реєстрації сигналу ЯМР – метод повільного проходження та Фур'є-спектроскопія. Вплив радіочастотного імпульсу на макроскопічну ядерну намагніченість. Спад вільної індукції (СВІ). Фур'є перетворення кривої спаду вільної індукції. Переваги Фур'є ЯМР-спектроскопії над методом повільного проходження. Блок-схема спектрометра ЯМР. Квадрупольна детекція. Характеристики приладів ЯМР – чутливість та роздільна здатність, робоча частота. Використання градієнтних імпульсів. Обертання зразка та його наслідки. Фазові цикли, застосування. Розчинники в ЯМР та вимоги до них.)</p>			
<p>Тема 7. Хімічний зсув сигналів ЯМР: зв'язок з будовою хімічних сполук. (Хімічне зміщення сигналу ЯМР, константа екранування ядер. Одиниці вимірювання хімічного зсуву в спектроскопії ЯМР. Поняття про ізохронні, хімічно (не)еквівалентні, магнітно (не)еквівалентні ядра. Еталонні речовини в спектроскопії ЯМР та вимоги до них, шкали хімічних змещень. Залежність хімічного зсуву від будови речовин (на прикладі ¹H-ЯМР та ¹³C-ЯМР. Магнітно-анізотропні групи, їх вплив на навколишні ядра. Кільцеві ароматичні токи, їх вплив на резонанс навколишніх ядер. Використання хімічного зсуву в структурних дослідженнях. Кореляційні таблиці хімічних зсувів.)</p>	2		

<p>Тема 8. Спін-спінова взаємодія: її прояв в спектрах ЯМР, використання. (Спін-спінова взаємодія, її прояв в спектрах ЯМР. Мультиплетність сигналів ЯМР. Правила розщеплення ЯМР сигналів першого порядку. Константи спін-спінової взаємодії (КССВ), їх класифікація в залежності від кількості зв'язків між магнітними ядрами. Позначення спінових систем. Типовий вигляд сигналів ЯМР спінових систем АХ, АВ, АМХ, АВС, АА'ВВ', АА'ХХ'. ЯМР Магнітних ядер в діастереотопних групах. Ефекти вищого порядку в спектрах ЯМР. Залежність КССВ від геометрії молекул. Залежність Карплуса.)</p>	2		
<p>Тема 9. Спектроскопія ЯМР на ядрах ^{13}C. Порівняння з ^1H-ЯМР-спектроскопією. (Методики з'йомки спектрів на ядрах ^{13}C, особливості (в порівнянні зі спектрами на ядрах ^1H). Експерименти INEPT, DEPT. Кореляційні таблиці хімічних зсувів, типові (характеристичні) значення хімічних зміщень для спектроскопії на ядрах ^{13}C.)</p>	2		
<p>Практичне заняття 2. Технічні деталі отримання ЯМР-спектрів. Розв'язування задач з інтерпретації спектрів ЯМР на ядрах ^1H та ^{13}C.</p>		4	8
<p>Тема 10. Спеціальні методики в ЯМР. Декаплінг. Ядерний ефект Оверхаузера. Динамічні ефекти в ЯМР. (Подвійний резонанс, практичне використання в ЯМР. Явище насичення в ЯМР, практичне застосування. Ефект Оверхаузера, практичне застосування. Природа явища ЯЕО. Шкала часу в ЯМР; швидкі та повільні процеси з точки зору ЯМР. Практичне знаходження константи швидкості обмінного процесу за спектрами ЯМР.)</p>	2		
<p>Тема 11. Мультиядерний ЯМР. Динамічні ефекти в ЯМР. (Поняття про шкали хімічних зміщень та властивості спектрів ЯМР на магнітних ядрах ізотопів ^{19}F, ^{31}P, ^{15}N, ^{14}N. Шкала часу в ЯМР; швидкі та повільні процеси з точки зору ЯМР. Практичне знаходження константи швидкості обмінного процесу за спектрами ЯМР. ЯМР парамагнітних речовин, зсув та уширення сигналів ЯМР.)</p>			
<p>Тема 12. Твердотільний ЯМР. (Проблеми, пов'язані з вимірюванням спектрів ЯМР твердих тіл. Звуження ліній в спектрах ЯМР твердих тіл – обертання зразків під магнітним кутом та імпульсне звуження ліній. Використання крос-поляризації. ЯМР монокристалів та орієнтованих мембран. Анізотропія хімічного зсуву та констант дипольної взаємодії. Приклади досліджень методами твердотільної ЯМР-спектроскопії.)</p>			

<p>Тема 13. Двовимірні методики в ЯМР. Типи двовимірних спектрів. (Поняття про двовимірну спектроскопію ЯМР. Принципова відмінність двовимірних спектрів ЯМР від одновимірних. Типи двовимірних спектрів. Двовимірні кореляційні спектри: методики COSY, TOCSY, HSQC, HMBC, NOESY, INADEQUATE. Способи зображення двовимірних спектрів. Двовимірна J-спектроскопія – кореляція хімічних зсувів з константами спін-спінової взаємодії. Типи задач у хімії і біології, що можуть бути розв’язані за допомогою двовимірних кореляційних спектрів. Приклади)</p>	2		
<p>Тема 14. Двовимірні методики в ЯМР. Використання. (Типи задач у хімії і біології, що можуть бути розв’язані за допомогою двовимірних кореляційних спектрів. Приклади)</p>	2		
<p>Практичне заняття 3. Розв’язування задач з інтерпретації двовимірних спектрів ЯМР.</p>		4	8
<p>Розділ 3.</p>			
<p>Тема 15. Електронна спектроскопія. (Детермінація поняття електронна спектроскопія. Електромагнітний спектр поглинання та його області. Діапазон спектру, що відповідає за електронні переходи (а саме за переходи валентних електронів). Зв’язок з іншими видами спектроскопії, зокрема з ІЧ спектроскопією. Енергія та частота електромагнітного випромінювання. Електронна, коливальна та оберտальна складові енергії. Енергетичні підрівні. Зв’язок з фізикою та квантовою хімією.)</p>	2		
<p>Тема 16. Фізична природа забарвлення речовин. (Основні та додаткові кольори. Природа УФ та видимого спектру. Основні закони поглинання оптичного випромінювання: закон Бугера-Ламберта, закон Бера та об’єднаний закон Бугера-Ламберта-Бера. Крива спектру поглинання. Молекулярні орбітали на прикладі етилену, бутадієну, формальдегіду. ВЗМО та НВМО. Довгохвильовий електронний перехід. Поняття про π-π^* та n-π^* переходи. Приклади електронних спектрів неорганічних та органічних сполук. Використання електронної спектроскопії для ідентифікації хімічних речовин та аналізу двокомпонентних сумішей. Яскраві приклади використання у біології. Ілюстрація спектру гемоглобіну.)</p>	2		
<p>Тема 17. Практичні аспекти використання електронної спектроскопії. (Кювети. Підбір розчинників та концентрації. Розрахунок екстинції. Аналіз двокомпонентних сумішей. Аналіз кето-енольної рівноваги. Порівняння з використанням спектрів ПМР. Чутливість електронної спектроскопії. Електронні спектри основних класів органічних сполук. Алкани та їх похідні. Галоїдзаміщені сполуки, спирти, меркаптани, аміни, етери. Алкени. Карбонільні та карбоксильні сполуки. Тіакарбонільні сполуки. Азотетини. Нітро- та нітрозосполуки. Спряжені полієнові системи. Дієни. Спряжені полієнові системи. Правила Фізера - Вудворда та Фізера - Куна. Алкіни. Поліалкіни. Ароматичні сполуки. Бензол та його похідні. Лінійні та ангулярні конденсовані ароматичні сполуки.</p>	2		

Гетероциклічні сполуки. Пяти- та шестичленні ненасичені гетероцикли)			
Тема 18. Спектроскопія поглинання та флуоресценції. (Принцип Франка - Кондона. Інтенсивність вібронних переходів. Форма смуг поглинання та випромінювання. Флуоресценція та фосфоресценція. Дзеркальна симетрія спектрів поглинання та люмінесценції. Частота 0 - 0 переходу. Незалежність смуг люмінесценції від довжини хвилі збудження. Стоксів зуев. Діаграма Яблонського. Типи електронних переходів. Поляризаційні спектри поглинання та люмінесценції. Поняття про синглетний і триплетний стани. Флуоресценція та фосфоресценція. Коливальна релаксація. Внутрішня та інтеркомбінаційна конверсія.)	2		
Розділ 4			
Тема 19. Коливальна (ІЧ) спектроскопія. (Теорія ІЧ-поглинання. Частота гармонійного осцилятора. Координати і форми нормальних коливань. Силова стала. Ангармонічні коливання. Обертони. Комбінаційні смуги, резонанс Фермі. Ізотопні ефекти. Інтенсивність смуг поглинання.)	2		
Тема 20. Використання ІЧ-спектроскопії в хімічних і біологічних дослідженнях. (Використання концепції групових (характеристичних) коливань для аналізу ІЧ спектрів. Характеристичні коливання. Фактори, які впливають на значення характеристичних частот. Кореляційні таблиці. Характеристика окремих областей ІЧ спектрів. Приклади інтерпретації ІЧ-спектрів)	2		
Тема 21. Раманівська спектроскопія та мікроскопія. (Історія відкриття та теорія Раманівської спектроскопії (спектроскопії комбінаційного розсіювання, КР). Блок-схема приладу. Типові спектри КР, принципи їх інтерпретації. Ідентифікація сполук за допомогою КР. Порівняння ІЧ та Раманівської спектроскопій. Раманівська мікроскопія, Раманівська томографія, підсилена поверхнею Раманівська спектроскопія, підсилена щупом Раманівська спектроскопія. Вивчення біооб'єктів методом КР.)	2		
Тема 22. Електронний парамагнітний резонанс. (Історія відкриття та теорія ЕПР. Основні принципи електронного парамагнітного резонансу. Електронний ефект Зеемана. Взаємодія магнітних диполей з електромагнітним випромінюванням. Параметри, які характеризують спектри ЕПР. Релаксація і ширина ліній ЕПР. Хімічні об'єкти, які можна досліджувати методом ЕПР спектроскопії. g-Фактор. Природа надтонкої взаємодії. Системи з $S = \frac{1}{2}$ і $I = \frac{1}{2}$ та $S = \frac{1}{2}$ і $I = \frac{3}{2}$. Інтерпретація ізотропних спектрів ЕПР. Спектри ЕПР органічних радикалів, які містять одну групу еквівалентних ядер. Спектри ЕПР органічних радикалів, які містять кілька груп еквівалентних ядер. Деякі правила інтерпретації ЕПР спектрів радикалів. Спінові мітки в біомолекулах.			
Тема 23. Ротаційна (мікрохвильова) спектроскопія. (Основні принципи мікрохвильової спектроскопії.			

Мікрохвильовий спектрометр Болла-Флайгара. Момент інерції молекул, наближення жорсткого ротатора. Використання мікрохвильової спектроскопії для визначення молекулярної структури на прикладі спектру двохатомної молекули. Центрифугійне спотворення. Квадрупольне розщеплення. Приклади спектрів.)			
Тема 24. Поверхневий плазмонний резонанс. (Поняття плазмону. Плазмонна частота. Явище повного внутрішнього відбиття. Зникаюче поле. Умови виникнення поверхневого плазмонного резонансу. Криві ППР. Застосування ППР в біомедичних дослідженнях та в медичній хімії).			
Практичне заняття 4. Розв'язування комбінованих задач (розшифровка структури невідомих сполук з використанням мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії).		8	8
Тема 25. Сучасні стратегії розв'язання структурних задач в хімії і біології за допомогою фізичних методів дослідження. (Розгляд прикладів).	2		
Практичне заняття 5. Розв'язування задач з використанням двовимірних ЯМР-спектрів (розшифровка структури невідомих сполук).		8	8

Загальний обсяг 138 год., в тому числі:

Лекції – 50 год.

Практичні – 24 год.

Консультації – 8 год.

Самостійна робота – 56 год.

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. - 493 с.
2. Воловенко Ю.М., Комаров І.В., Туров О.В., Хиля В.П. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу для хіміків. Видавництво Київського університету, Київ, 2017 р., 685 с.
3. Воловенко Ю.М., Комаров І.В., Туров О.В., Хиля В.П. Практикум зі спектроскопії ЯМР. Видавництво Київського університету, Київ, 2016 р., 335 с.

Додаткова:

1. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. Издательство: М.: Мир, 1992, 228 с.

10. Додаткові ресурси та інформація.

Інтернет-ресурси.

Контрольні запитання до Розділу 1.

1. В чому відмінність між спектроскопічними та неспектроскопічними методами дослідження?
2. Який основний принцип мас-спектрометрії?
3. Які хімічні проблеми можна вирішити за допомогою мас-спектрометрії?
4. Які Ви знаєте методи йонізації хімічних сполук? Що є перевагами, а що – недоліками кожного з методів?
5. Які фізичні принципи покладено в основу аналізу йонів та їх детекції?
6. Що таке мас-спектр, які його основні параметри?
7. Як знайти молекулярний йон в мас-спектрах?
8. Що таке ізотопні піки, та як їх використовують в мас-спектрометрії?
9. Наведіть приклади характеристичних осколочних йонів в мас-спектрах основних класів органічних сполук.
10. В чому полягають основні проблеми дослідження за допомогою мас-спектрометрії біологічних молекул (протеїнів, ліпідів, нуклеїнових кислот)?

Контрольні запитання до Розділу 2:

1. Чому для отримання спектрів ЯМР необхідно помістити зразок, що досліджується, в магнітне поле?
2. Які математичні моделі використовуються для описання поведінки магнітних ядер в магнітному полі?
3. Що називають „основним рівнянням ЯМР”?
4. В чому полягає відмінність між Фур’є-ЯМР та методом повільного проходження в ЯМР?
5. Як можна підвищити роздільну здатність та чутливість ЯМР спектрометрів?
6. Чому зразок, як правило, обертають в датчику ЯМР для отримання якісного ЯМР-спектра?
7. Чим відрізняються ізохронні, хімічно еквівалентні та хімічно нееквівалентні ядра?
8. Поясніть відмінність між кuartетом, дублетом дублетів, двома дублетами.
9. Константи спин-спінової взаємодії є стереоспецифічними. Що це означає?
10. Якими будуть наслідки додаткового опромінення зразка радіочастотним полем, що проявляються в спектрах ЯМР?
11. Що сталося б з ЯМР-спектроскопією, якщо б не існувало явища релаксації?
12. Які особливості спектроскопії ЯМР на ядрах ^{13}C , в порівнянні з ^1H -ЯМР спектроскопією?
13. Що означає вислів: „процес є повільним в шкалі часу ЯМР”?
14. В чому полягає принципова відмінність двовимірних спектрів ЯМР від одновимірних?
15. Які Ви знаєте типи двовимірних експериментів ЯМР? Для вирішення яких задач вони використовуються?
16. Які параметри ЯМР використовуються при дослідженні будови протеїнів цим методом?

Контрольні запитання до Розділу 3:

1. Яким є зв'язок електронної спектроскопії з фізикою та іншими видами спектроскопії?
2. Що таке основні та додаткові кольори?
3. Поняття про π - π^* та n - π^* переходи.
4. Закон Бугера – Ламберта - Бера.
5. Принцип Франка - Кондона.
6. Флуоресценція та фосфоресценція.
7. Дзеркальна симетрія спектрів поглинання та люмінесценції. Стоксів зсув.
8. Діаграма Яблонського
9. Електронні спектри основних класів органічних сполук.
10. Сольватохромія.
11. Хромофори та ауксохроми. Батохромний та гіпсохромний зсув.
12. Ціанінові барвники.

Контрольні запитання до Розділу 4.

1. Чому для поглинання світла необхідно, щоб виконувалась умова Бора?
2. Коливання двохатомних молекул у наближенні гармонічного осцилятора.
3. Яка причина ангармонізму коливань для реальних молекул? Як ангармонізм впливає на ІЧ спектри?
4. Назвіть фактори, які необхідно враховувати при підборі розчинника для ІЧ спектроскопічних досліджень.
5. Яка причина виникнення резонансу Фермі? Як резонанс Фермі впливає на вигляд ІЧ- і КР-спектрів? Наведіть приклади речовин, в коливальних спектрах яких проявляється резонанс Фермі.
6. Види деформаційних коливань.
7. Чи існує інфрачервоний спектр поглинання для молекул H_2 , O_2 , H_2O , CO_2 , CO , $HCHO$, NH_3 , CCl_4 . Відповідь обґрунтуйте.
8. Природа спектрів комбінаційного розсіювання (СКР).
9. Залежність положення смуги поглинання від кратності зв'язку на прикладі вуглеводнів.
10. Залежність положення смуги поглинання від кратності зв'язку на прикладі карбонільних сполук.
11. Особливості поглинання 1,2-, 1,3- та 1,4-дикарбонільних сполук.
12. Фактори, що впливають на положення та інтенсивність смуги поглинання подвійних та потрійних зв'язків.
13. Особливості поглинання ангідридів карбонових кислот.
14. Визначення *цис*- та *транс*-ізомерів за допомогою ІЧ-спектроскопії.
Приклади.
15. Особливості поглинання амідів карбонових кислот.
16. Ідентифікація амінокислот за допомогою ІЧ-спектрів.
17. Електронний ефект Зеємана. Від чого залежить енергія розщеплення спінових рівнів електрона? Чому в спектроскопії ЕПР використовуються

магнітні поля, напруженість яких значно менша, ніж у спектроскопії ЯМР?

18. В чому суть методу спектроскопії ЕПР? Показати на конкретному прикладі, які основні параметри характеризують спектри ЕПР і як вони визначаються. Які речовини можна досліджувати методом ЕПР?
19. Що таке релаксація і яка роль спін-граткової релаксації в ЕПР спектроскопії? Пояснити, чому ширина ліній в спектрах ЕПР вільних радикалів і сполук перехідних металів відрізняється іноді в сотні разів?
20. Як залежить можливість реєстрації спектрів ЕПР від електронної конфігурації іонів металів? Який ступінь окиснення повинні мати нікель, кобальт, ванадій, платина, щоб їх сполуки можна було досліджувати методом ЕПР спектроскопії?
21. Як впливають температура, природа розчинника, концентрація розчину, наявність процесів хімічного обміну в розчинах на ширину ліній ЕПР і на форму спектрів?
22. Що таке g-фактор? Чому його значення у спектрах сполук відрізняється від g-фактора вільного електрона? Чому в наукових статтях практично ніколи не вказують значення g-фактора для спектрів ЕПР вільних радикалів?
23. На яких фізичних явищах базується Раманівська спектроскопія і мікроскопія?
24. Чи є інформація, яку можна отримати методами ІЧ та КР спектроскопії, ідентичною?
25. Які процеси відбуваються при поглинанні речовинами мікрохвильового випромінювання?
26. Сформулюйте умови виникнення явища поверхневого плазмонного резонансу.