

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Навчально-науковий інститут високих технологій
Кафедра супрамолекулярної хімії**



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник директора
з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

«24» травня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ В ХІМІЇ
для студентів

галузь знань 10 «Природничі науки»
спеціальність 105 «Прикладна фізика і наноматеріали»
освітній рівень Бакалавр
освітньо-професійна
програма НАНОФІЗИКА ТА КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ
спеціалізація
вид дисципліни Вибіркова

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	8
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: Гринь С.В., доцент кафедри супрамолекулярної хімії

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

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

КИЇВ – 2022

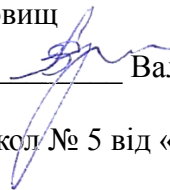
Розробники:

Комаров І.В., д.х.н, професор кафедри супрамолекулярної хімії

Гринь С.В., к.х.н., доцент кафедри супрамолекулярної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри нанофізики конденсованих середовищ



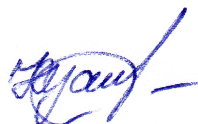
Валерій Скришевський

Протокол № 5 від «19» квітня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією інституту високих технологій

Протокол від «13» травня 2022 року № 4

Голова науково-методичної комісії



Русінчук Н. М.

ВСТУП

1. Мета дисципліни – формування у майбутніх фахівців з прикладної фізики та наноматеріалів уявлень про сучасні фізичні методи досліджень (а саме, спектроскопію в УФ та видимій області, інфрачервону спектроскопію, мас-спектрометрію та ядерний магнітний резонанс), принципи, які покладені в основу методів та їх застосування в дизайні матеріалів та хімії для розв'язання завдань ідентифікації, кількісного аналізу та встановлення структури речовин.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):

1. Успішне опанування курсів “Загальна хімія” або “Будова речовини та неорганічна хімія”,
2. Знання будови атомів, простих та складних неорганічних та органічних сполук та типів зв'язків між ними,
3. Володіти навичками логічного мислення.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Мета курсу: дати студентам уявлення про принципи та можливості сучасних методів досліджень. Студент повинен зрозуміти природу фізичних явищ, покладених в основу методів та використовувати їх на практиці, для встановлення природи та будови речовини на основі даних фізичних методів аналізу (повна або часткова ідентифікація речовини в залежності від методу, кількісний аналіз). Курс покликаний формувати цілісну картину світу та взаємозв'язок між дисциплінами.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчання дисципліні має на меті розвинути у студентів такі загальні та фахові компетентності:

ЗК01. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК03. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово..

ЗК06. Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК07. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК09 Здатність працювати автономно.

ЗК10 Навички здійснення безпечної діяльності.

ЗК13. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями, уміннями, у тому числі в сфері, відмінної від професійної.

ЗК16 Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК18 Здатність працювати в команді.

ФК1 Здатність брати участь у плануванні та виконанні наукових та науково-технічних проектів.

ФК2 Здатність брати участь у плануванні і виконанні експериментів та лабораторних досліджень властивостей фізичних систем, фізичних явищ і процесів, обробленні й презентації їхніх результатів.

ФК3 Здатність брати участь у виготовленні експериментальних зразків, інших об'єктів дослідження.

ФК4 Здатність брати участь у впровадженні результатів досліджень та розробок.

ФК6 Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем.

ФК8 Здатність працювати в колективах виконавців, у тому числі в міждисциплінарних проектах.

ФК9 Здатність використовувати знання про фізичну природу об'єктів у роботах по створенню нових приладів, апаратури, обладнання, матеріалів і речовин, зокрема, наноматеріалів чи удосконалення існуючих.

ФК10 Здатність реалізовувати автоматизацію експериментальних досліджень у різних сферах науки із використанням сучасних комп'ютерних технологій.

ФК12 Вибірковий блок 1 Здатність розробляти, діагностувати та використовувати пристрої електроніки в сучасній науці.

ФК12 Вибірковий блок 2 Знання фізичних основ сучасного експериментального обладнання та вміння застосовувати їх до вибору, проектування, виготовлення та удосконалення вимірювальних приладів для застосувань у природничих науках.

5. Результати навчання за дисципліною: (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

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 (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати основні принципи, що покладені в основу фізичних методів досліджень, можливості цих методів та сфери їхнього застосування	Лекція, лабораторне заняття, самостійна робота студентів	Тестові та модульні контрольні роботи	20%
1.2	Мати уявлення: про принципи роботи сучасних приладів, вимоги до пробопідготовки, чутливість окремих методів.	Лекція, лабораторне заняття, самостійна робота студентів	Тестові та модульні контрольні роботи	10%
2.1	Вміти застосовувати результати різних фізичних методів дослідження для аналізу речовин, встановлення їх будови та структури.	Лекція, лабораторне заняття самостійна робота студентів, консультація	модульні контрольні роботи	50%
4.1	Вміти самостійно інтерпретувати результати спектральних досліджень речовини.	самостійна робота студентів	Тест, модульні контрольні роботи	20%
4.2	Обирати найбільш придатні для розв'язання поставленої задачі (ідентифікація, встановлення кількості речовини тощо) методи	Лабораторне заняття, самостійна робота студентів		

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін які не входять до блоків спеціалізації)

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	2.1	4.1	4.2
Програмні результати навчання					
ПР 1. Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.	+	+			
ПР3 Застосовувати ефективні технології, інструменти та методи експериментального дослідження властивостей речовин і матеріалів, включаючи наноматеріали, при розв'язанні практичних проблем прикладної фізики.	+	+	+	+	+
ПР 5. Вибирати ефективні методи та інструментальні засоби проведення досліджень у галузі прикладної фізики.			+		

ПР06. Відшукувати необхідну науково-технічну інформацію в науковій літературі, електронних базах, інших джерелах, оцінювати надійність та релевантність інформації.		+	+	+	+
ПР12 Розуміти закономірності розвитку прикладної фізики, її місце в розвитку техніки, технологій і суспільства, у тому числі в розв'язанні екологічних проблем.	+	+			
ПРН19-2 Вибірковий блок 2: На основі отриманих знань проектувати та створювати автоматизовані експериментальні установки для проведення досліджень в природничих науках.			+	+	+
ПРН20-2 Вибірковий блок 2: Обслуговувати, діагностувати та удосконалювати існуючі експериментальні установки, що використовуються для різних потреб в галузі фізики, хімії та біології.			+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів

Контроль знань здійснюється за модульно-рейтинговою системою, яка складається із 2 змістових модулів. Система оцінювання знань включає поточний, модульний та семестровий контроль знань. Результати навчальної діяльності студентів оцінюються за 100-бальною шкалою. Форми поточного контролю: оцінювання домашніх робіт, письмових самостійних завдань, тестів та контрольних робіт, виконаних студентами під час практичних занять. Студент може отримати максимально 60 балів за виконання домашніх робіт, самостійних завдань, усні відповіді, тести, доповнення на лабораторних (по 30 балів у кожному змістовому модулі). Модульний контроль: 2 модульні контрольні роботи (МКР). Підсумковий семестровий контроль проводиться у формі екзамену (40 балів). Екзаменаційний білет включає 1 теоретичне питання (20 балів) та 1 задачу (20 балів).

У випадку відсутності студента з поважних причин здійснюються відпрацювання та перездачі МКР.

Оцінювання за формами контролю:

	ЗМ1		ЗМ2	
	Min. 0 балів	Max. 30 балів	Min.0 балів	Max. 30 балів
Домашні завдання, письмові самостійні завдання		10		10
Лабораторні роботи		5		5
Модульна контрольна робота		15		15

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою 24 балів.

Студент не допускається до екзамену, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів (рекомендований мінімум – 36 балів). Для студентів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум для одержання екзамену/заліку обов'язкова перездача МКР.

7.2 Організація оцінювання: Модульний контроль проводиться за графіком модульних контрольних робіт на практичних заняттях.

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**

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостій на робота
ЗМ1: Методи електронної та інфрачервоної спектроскопії				
1	<i>Тема 1.</i> Характеристики електромагнітного випромінення: довжина хвилі, частота, енергія, спектральний діапазон, хвильове число. Поглинання та випромінення світла. Оптична густина, закон Бугера-Ламберта-Бера, умови його виконання. Принцип методу UV-VIS спектроскопії. Електронні переходи: класифікація за типом та інтенсивністю. Молекули, що поглинають. Хромофори та аукохроми та їх взаємний вплив.	2	2	10
2	<i>Тема 2.</i> UV-VIS-фотометри та спектрофотометри. Застосування спектроскопії в УФ- та видимій області для кількісного та якісного аналізу. Типові органічні хромофори. Найбільш поширені неорганічні хромофори. <i>Спектри випромінювання</i> (емісійні спектри). Флуоресцентна спектроскопія. Принцип молекулярної флуоресценції. Взаємозв'язок між спектрами збудження та поглинання. Обладнання та практичне застосування. Флуоресцентні зонди	2	4	10
3	<i>Тема 3. ІЧ-спектроскопія.</i> Принцип методу. Обладнання та пробопідготовка для ІЧ-спектроскопії. Можливості методу, використання для кількісного та якісного аналізу. ІЧ-ФП-спектрометр. Інтерпретація ІЧ-спектрів. Основні принципи. Характеристичні частоти функціональних груп у органічних молекулах. КР-спектроскопія.	2	2	10
	<i>Контрольна робота № 1</i>		x	
ЗМ2: Мас-спектрометричні методи аналізу та ЯМР-спектроскопія				
4	<i>Тема 4.</i> Основи мас-спектрометрії. Методи іонізації: електронний удар, хімічна іонізація, електроспей, хімічна іонізація при атмосферному тиску, лазерна десорбція-іонізація. Типи мас-аналізаторів: магнітосекторний, йонна пастка, квадруполь, часопротітний. Тандемна мас-спектрометрія. Хроматографічні методи аналізу у поєднанні з мас-спектрометрією.	4	2	10
5	<i>Тема 5.</i> Інтерпретація спектрів електронного удару. Визначення піку молекулярного іона. Визначення молекулярної формули. Ізотопні піки.	2	2	10

	Фрагментація та перегрупування. Мас-спектри основних класів органічних сполук. Бібліотеки мас-спектрів. Приклади застосування мас-спектрометрії для аналізу матеріалів.			
6	Тема 6. ^1H –ЯМР- спектроскопія. Магнітні властивості ядер. Збудження та релаксація ядер. Простий експеримент в ЯМР-спектроскопії. Найбільш популярні розчинники. Хімічний зсув та інтегральна інтенсивність. Спін-спінова взаємодія, мультиплетність сигналів. Прості та складні мультиплети першого порядку. Спінкові системи.	2	2	10
7	Тема 7. Аналіз спінових систем першого порядку. Магнітно-анізотропні групи. КССВ- константи сін-спінової взаємодії. Застосування методу для аналізу структури органічних речовин. Обмінні процеси та їх значення. Імітація простих спектрів за допомогою розрахункових програм типу ChemDraw 12.0	4	4	10
8	Тема 8. ^{13}C - ЯМР спектроскопія. Теорія та можливості методу. Різні види експериментів: ^{13}C - ^1H розв'язка по спіну, ефект Оверхаузера, DEPT експеримент. Інші магнітні ядра та їх застосування.	2	2	10
	<i>Модульна контрольна робота №2</i>		x	
	ВСЬОГО	20	20	80

Загальний обсяг – 120 год., в тому числі (вибрати необхідне):

Лекцій – **20 год.**

Лабораторних занять – **20 год.**

Самостійна робота – **80 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Мельничук Д.О. Аналітичні методи досліджень. Спектроскопічні методи аналізу: теоретичні основи і методики: навчальний посібник для підготовки студентів вищих навчальних закладів / Д.О. Мельничук, С.Д. Мельничук, В.М. Войціцький та ін.: за ред. акад. Д.О. Мельничука. – К.: ЦП «Компринт», 2016. – 289 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.
4. Smith, R. Martin. Understanding mass spectra : a basic approach. – 2nd ed. / R. Martin Smith Copyright # 2004 by John Wiley & Sons,

10. Додаткові ресурси:

<https://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser/>