

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально-науковий Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Основи сучасної спектроскопії та мікроскопії

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки (шифр і назва)
спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали (шифр і назва спеціальності)
освітній рівень магістр (молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма Високі технології (прикладна фізика та наноматеріали) (назва освітньої програми)
вид дисципліни обов'язкова

Форма навчання денна
Навчальний рік 2022/2023
Семестр 1,2
Кількість кредитів ECTS 6
Мова викладання, навчання та оцінювання українська
Форма заключного контролю іспит

Викладач: д.х.н., проф. Комаров І.В.

(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

Розробник: д.х.н., проф. Комаров І.В.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри Рябухін С.В.

()

(підпис, прізвище та ініціали)

Протокол № 5 від «08» 04 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол № 4 від «13» 05 2022 року

Голова науково-методичної комісії

() (Русінукх Н.М.)

(підпис, прізвище та ініціали)

1. Мета дисципліни:

Повторення студентами основних теоретичних положень методів ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії і мас спектрометрії, знайомство з сучасними методиками у даній галузі, використання теоретичних знань для поліпшення практичних навичок з інтерпретації відповідних спектрів, встановлення складу і будови складних хімічних сполук.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент повинен знати:

Основи фізики, біології, загальної, неорганічної та органічної хімії, основи сучасних фізичних методів дослідження – ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії та мас-спектрометрії.

Студент повинен вміти:

Користуватися сучасними електронними Інтернет-ресурсами, що є у відкритому доступу, зокрема, довідковими даними, що стосуються фізичних методів дослідження хімічних сполук, інтерпретувати ЯМР, ІЧ, електронні спектри поглинання та мас-спектри.

3. Анотація навчальної дисципліни

Навчальна дисципліна присвячена актуалізації знань з методів дослідження хімічних сполук, що базуються на фізичних явищах. Ці методи сьогодні є невід'ємною частиною сучасної науки. Вони широко використовуються для встановлення складу і будови хімічних сполук. Цьому сприяє поява нової сучасної апаратури і комп'ютерних методів обробки спектрів, що значно розширює можливості спектральних методів. Особлива увага приділяється подальшому вдосконаленню практичних навичок з інтерпретації експериментальних даних, та плануванню експериментальних досліджень виходячи з конкретних завдань. Протягом курсу будуть розв'язуватись складні практичні завдання з досліджень складу і будови хімічних сполук.

4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності: ІК. Здатність самостійно ставити та розв'язувати на інноваційному рівні наукові та науково-технічні задачі проблеми у галузі прикладної фізики, нанофізики, наноматеріалознавства та високих технологій, пов'язані із виготовленням, аналізом властивостей, використанням наноматеріалів, проектування та виготовлення наносенсорних систем, що передбачає застосування теоретичних знань та навичок з фізики, математики, інженерії, програмування, вибраних розділів хімії та біології.

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК2. Здатність спілкуватися державною та іноземною мовами як усно, так і письмово.

ЗК5. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК6. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК9. Здатність працювати автономно.

ЗК11. Здатність до подальшого навчання, яке значною мірою є автономним та самостійним.

ЗК12. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу

ЗК13. Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми, що потребує оновлення та інтеграції знань, часто в умовах неповної/недостатньої інформації та суперечливих вимог.

ЗК17. Володіння спеціалізованими концептуальними знаннями, набутими у процесі навчання та/або професійної діяльності на рівні новітніх досягнень, які є основою для оригінального мислення та інноваційної діяльності, зокрема в контексті дослідницької роботи.

ФК1. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК2. Здатність оптимально визначити матеріальні засоби, необхідні для проведення наукового дослідження або науково-технічної розробки (матеріали, апаратура, обладнання, обчислювальна техніка та інше).

ФК3. Здатність аналізувати отримані результати, презентувати їх фахівцям у даній галузі, оформлювати наукові статті та науково-технічні звіти.

ФК7. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу, критичного осмислення проблем у професійній діяльності та на межі предметних галузей.

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> <p>1.1. фізичну суть мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії;</p> <p>1.2. сучасні методики фізичних методів досліджень;</p> <p>1.3. основні типи задач, які можна розв'язувати за допомогою методів, що розглядаються в курсі;</p> <p>1.4. способи приготування зразків для досліджень, експериментальні умови з'йомки спектрів.</p>	<p>Лекції</p> <p>Відео, екскурсії в дослідницькі лабораторії</p>	Контрольні роботи	35%
2.	<p>Вміти:</p> <p>2.1. інтерпретувати експериментальні дані мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії, якщо вони отримані для відомих сполук;</p> <p>2.2. визначати склад і будову складних сполук за даними мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії, користуючись довідниками, у тому числі, Інтернет-ресурсами.</p>	<p>Лабораторні заняття</p> <p>Лабораторні заняття</p>	<p>Контрольні роботи</p> <p>Контрольні роботи</p>	<p>30%</p> <p>15%</p>
3.	3.1. Вміти працювати в групі на практичних роботах	Лабораторні заняття	Звіти	10%
4.	4.1. Вміти самостійно працювати з навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.	Самостійна робота	Контрольна робота	10%

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. Лабораторні – 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 заліку:

Студент допускається до заліку за умови виконання всіх передбачених планом практичних завдань. Студент не допускається до заліку, 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

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та практичних занять

Номер і назва теми*	Кількість годин		
	лекції	Лабораторні заняття	Самостійна робота
Розділ 1			
Тема 1. Спектроскопічні і неспектроскопічні методи дослідження. Ядерний магнітний резонанс, основні одновимірні методики (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). алгоритм отримання спектрів сучасними спектрометрами ЯМР. Декаплінг, DEPT, INEPT, визначення і застосування ЯЕО. Подавлення інтенсивних сигналів ЯМР)	4		8
Тема 2. Ядерний магнітний резонанс, основні одновимірні методики. (методики COSY, TOCSY, HSQC, HMBC, NOESY, INADEQUATE. Способи зображення двовимірних спектрів. Двовимірна J-спектроскопія – кореляція хімічних зсувів з константами спін-спінової взаємодії.)	4		8
Лабораторне заняття 1. Ознайомлення з основними одновимірними методиками ЯМР.		4	10
Тема 3. Сучасні методики мас-спектрометрії. (Сучасні методи йонізації та аналізу йонів, хромато-мас-спектрометрія)	4		8
Тема 4. Інтерпретація мас-спектрів. (Визначення брутоформули, молекулярних фрагментів за даними мас-спектроскопії.)	4		8
Тема 5. Комбіноване застосування хромато-мас-спектроскопії та ЯМР у сучасних дослідженнях. (Приклад дослідження з сучасної літератури.)	4		8
Лабораторне заняття 2. Розшифровка будови пептиду за даними мас-спектрометрії та ЯМР-спектроскопії.		6	10
Проміжний контроль			
1 семестр	20	10	60
Тема 6. Комбіноване застосування хромато-мас-спектроскопії та ЯМР у сучасних дослідженнях. (Приклад дослідження з сучасної літератури.)	4		8

Тема 7. Спеціальні методики в спектроскопії. Аналіз хіральних сполук. (Лантаноїдні реагенти, методи міток в ЯМР та флуоресцентній спектроскопії)	4		8
Тема 8. Спеціальні методики в спектроскопії. Дослідження наноматеріалів. (Приклади сучасних досліджень з літератури)	4		8
Лабораторне заняття 3. Інтерпретація двовимірних спектрів ЯМР.		3	5
Тема 9. 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)	4		8
Лабораторне заняття 4. Інтерпретації ІЧ-спектрів.		3	5
Тема 10. Раманівська спектроскопія та мікроскопія. (Розгляд прикладів).	4		8
Лабораторне заняття 5. Розшифровка структури невідомих сполук з використанням мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії, раманівської спектроскопії).		4	10
2-й семестр	20	10	60
Всього	40	20	120

Загальний обсяг *180 год.*, в тому числі:

Лекції – *40 год*

Лабораторні – *20 год.*

Самостійна робота – *120 год.*

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. 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.
2. 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. Deroum A. Modern NMR methods for chemistry. Elsevier, 1992, 228 с.