

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗА ГВЕРДЖУКО»  
Заступник директора  
з навчальної роботи  
Гребчук І. П.  
«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**Основи сучасної спектроскопії**

(повна назва навчальної дисципліни)

галузь знань 10 Природничі науки  
спеціальність 102 Хімія  
освітній рівень магістр  
освітньо-наукова програма Хемоінформатика  
спеціалізація високі технології  
вид дисципліни базова

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>другий</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

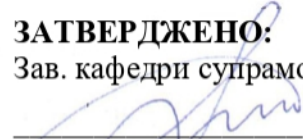
Викладач: д.х.н., проф. Комаров І.В.

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 супрамолекулярної хімії  
  
\_\_\_\_\_ (Рябухін С.В.)

**Протокол №7 від «19» серпня 2022 року**

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій  
**Протокол №1 від «9» вересня 2022 року**

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_  (Русінчук Н. М.)

## **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:

ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК 4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 5. Здатність до адаптації та дій в новій ситуації

ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт

ЗК 10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК 13. Здатність до активного збереження довкілля..

ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

ФК 2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК 3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.

ФК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК 8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

## 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 підсумкові й оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	<p><b>Знати:</b></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><i>Лекції</i></p> <p><i>Відео, екскурсії в дослідницькі лабораторії</i></p>	<i>Контрольні роботи</i>	35%
2.	<p><b>Вміти:</b></p> <p>2.1. інтерпретувати експериментальні дані мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії, якщо вони отримані для відомих сполук;</p>	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	30%
	<p>2.2. визначати склад і будову складних сполук за даними</p>	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	15%

	мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії, користуючись довідниками, у тому числі, Інтернет-ресурсами.			
3.	3.1. Вміти працювати в групі на практичних роботах	Практичні 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%

#### 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	3.1	4.1
<b>Програмні результати навчання</b>								
P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+			+		
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+					
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+	+					
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.		+						
P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.						+	+	+
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.		+		+	+			
P10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.		+		+	+			

## 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 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

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

## 8. Структура навчальної дисципліни.

### Тематичний план лекцій та практичних занять

Номер і назва теми*	Кількість годин		
	лекції	практичні заняття	Само-стійна робота
<b>Розділ 1</b>			
<b>Тема 1. Поняття про фізичні методи дослідження, основні терміни, класифікація методів, їх загальний огляд.</b> (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). Пряма та обернена 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		
<b>Тема 2. Застосування мас-спектрометрії для визначення складу і будови хімічних сполук.</b> (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, часопролітний, 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. 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, етерів, альдегідів, кетонів, карбонових кислот, нітрилів, естерів, амінів, гетероциклічних сполук). Найбільш характеристичні фрагментації молекулярних йонів з відщепленням нейтральних частинок. Характеристичні перегруповання йонів. Перегрупування Мак-Лаферті.)	2		
<b>Практичне заняття 1. Технічні аспекти зйомки мас-спектрів, принципи їх інтерпретації .</b>		2	12
<b>Розділ 2</b>			

<p><b>Тема 3. Основи методу ЯМР.</b> (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. 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. Способи реєстрації сигналу ЯМР – метод повільного проходження та Фур'є-спектроскопія. Розчинники в ЯМР та вимоги до них.)</p>	2		
<p><b>Тема 4. Хімічний зсув сигналів ЯМР: зв'язок з будовою хімічних сполук.</b> (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 зміщень. Залежність хімічного зсуву від будови речовин (на прикладі <math>^1\text{H}</math>-ЯМР та <math>^{13}\text{C}</math>-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><b>Тема 5. Спін-спінова взаємодія: її прояв в спектрах ЯМР, використання.</b> (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 AX, AB, AMX, ABC, AA'BB', AA'XX'. ЯМР Магнітних ядер в діастереотопних групах. Ефекти вищого порядку в спектрах ЯМР. Залежність КССВ від геометрії молекул. Формула Карплуса.)</p>	2		
<p><b>Тема 6. Основні параметри спектрів <math>^1\text{H}</math>-ЯМР – аналіз прикладів.</b> (Аналіз типових спектрів ЯМР на ядрах <math>^1\text{H}</math>. Знаходження та практичне використання параметрів ЯМР для дослідження складу та будови хімічних сполук.)</p>	2		
<p><b>Практичне заняття 2. Технічні деталі отримання ЯМР-спектрів. Розв'язування задач з інтерпретації спектрів ЯМР на ядрах <math>^1\text{H}</math> та <math>^{13}\text{C}</math>.</b></p>		2	12
<p><b>Тема 7. Спеціальні методики в ЯМР. Декаплінг. Ядерний ефект Оверхаузера. Динамічні ефекти в ЯМР.</b> (Подвійний резонанс, практичне використання в ЯМР. Явище насичення в ЯМР, практичне застосування. Ефект Оверхаузера, практичне застосування. Шкала часу в ЯМР; швидкі та повільні процеси з точки зору ЯМР. Практичне знаходження константи швидкості обмінного процесу за спектрами ЯМР.)</p>	2		



<b>Тема 8. Двовимірні методики в ЯМР. Типи двовимірних спектрів.</b> (Поняття про двовимірну спектроскопію ЯМР. ЕкПринципова 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)	2		
<b>Практичне заняття 3. Розв’язування задач з інтерпретації двовимірних спектрів ЯМР.</b>		2	12
<b>Тема 9. Використання ІЧ-спектроскопії в хімічних і біологічних дослідженнях.</b> (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		
<b>Практичне заняття 4. Розв’язування задач з інтерпретації ІЧ-спектрів.</b>		2	12
<b>Тема 10. Сучасні стратегії розв’язання структурних задач в хімії і біології за допомогою фізичних методів дослідження.</b> (Розгляд прикладів).	2		
<b>Практичне заняття 5. Розв’язування комбінованих задач (розшифровка структури невідомих сполук з використанням мас-спектрометрії, ЯМР, ІЧ, електронної спектроскопії).</b>		2	12

Загальний обсяг *90 год.*, в тому числі:

Лекції – *20 год*

Практичні – *10 год.*

Консультації – *4 год.*

Самостійна робота – *60 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. Сучасна фахова література (статті в журналах, огляди), що надається викладачем індивідуально в процесі проходження курсу здобувачами.

## **10. Додаткові ресурси та інформація.**

### **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 кваттетом, 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  $^{13}\text{C}$ , в порівнянні з  $^1\text{H}$ -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 процеси відбуваються у молекулах при поглинанні речовинами ІЧ-випромінювання?
17. Що таке характеристичні смуги поглинання в ІЧ-спектрах? Наведіть приклади.
18. Які параметри ЯМР використовуються при дослідженні будови протеїнів цим методом?