

**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД  
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»  
Навчально-науковий інститут хімії та екології  
Кафедра неорганічної хімії**



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Директор ІНІ хімії та екології

проф. Василь ЛЕНДЄЛ

«24» червня 2023 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**«ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ»**

Рівень вищої освіти

Галузь знань

Спеціальність

Освітня програма

Статус дисципліни

Мова навчання

**перший**

**10 Природничі науки**

**102 Хімія**

**Хімія**

**обов'язкова**

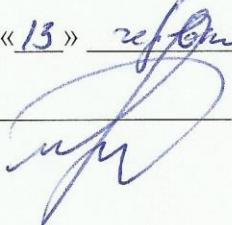
**українська**

Робоча програма навчальної дисципліни «Фізичні методи дослідження» для здобувачів першого рівня вищої освіти галузі знань **10 Природничі науки** спеціальності **102 Хімія** освітньої програми **Хімія**

**Розробник:** Кохан Олександр Павлович, доцент, кандидат хімічних наук, доцент кафедри неорганічної хімії ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

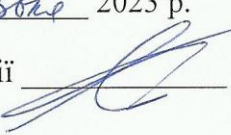
Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри неорганічної хімії

протокол № 12 від «13» серпня 2023 р.

Завідувач кафедри  Ігор БАРЧІЙ

Схвалено науково-методичною комісією Навчально-наукового інституту хімії та екології

протокол № 10 від «26» серпня 2023 р.

Голова науково-методичної комісії  Михайло СЛИВКА

© \_\_\_\_\_ 20\_\_\_\_ р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет 20\_\_\_\_ р.

# 1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

| Найменування показників                                                                                   | Розподіл годин за навчальним планом |                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-----------------------|
|                                                                                                           | Денна форма навчання                | Заочна форма навчання |
| Кількість кредитів ЄКТС – 3                                                                               | Рік підготовки                      |                       |
| Загальна кількість годин – 90                                                                             | 3-й                                 | -                     |
| Кількість модулів – 2                                                                                     | Семестр:                            |                       |
| Тижневих годин<br>для денної форми навчання:<br><br>аудиторних – 2<br><br>самостійної роботи студента – 3 | 5-й                                 |                       |
|                                                                                                           | Лекції:                             |                       |
|                                                                                                           | 24                                  |                       |
|                                                                                                           | Практичні (семінарські):            |                       |
|                                                                                                           | -                                   |                       |
| Вид підсумкового контролю:<br>екзамен                                                                     | Лабораторні:                        |                       |
|                                                                                                           | 20                                  |                       |
| Форма підсумкового контролю: усна                                                                         | Самостійна робота:                  |                       |
|                                                                                                           | 46                                  |                       |

## 2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення навчальної дисципліни «**Фізичні методи дослідження**» є формування у здобувачів вищої освіти базових знань в області хімії, як дисципліни, що інтегрує теоретичну і практичну підготовку хіміка. Високий рівень досліджень і цінність одержаних результатів безпосередньо пов'язані з правильністю вибору і застосуванням комплексу сучасних фізичних методів, що можуть допомогти при вирішенні поставлених перед дослідником хімічних і фізико-хімічних проблем.

Викладання даного курсу має на меті забезпечити розуміння принципів основ, практичних можливостей і обмежень найважливіших для хіміків фізичних методів дослідження, ознайомити з їх апаратурним оснащенням і умовами проведення експерименту, навчити інтерпретувати і грамотно оцінювати експериментальні дані, у тому числі й ті, що публікуються у науковій літературі.

Відповідно до освітньої програми, вивчення дисципліни «**Фізичні методи дослідження**» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

### **Загальні компетентності (ЗК):**

- ЗК 1 – здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу,
- ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.
- ЗК 5. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій
- ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел
- ЗК 11. Здатність бути критичним і самокритичним

### **Фахові компетентності (ФК):**

- ФК 1 – Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії;
- ФК 2 – здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії;
- ФК 5 – здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних
- ФК 8 – здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.
- ФК-13 Здатність до роботи в комп'ютерних мережах, використання сучасних інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) та програмних засобів для обробки хімічних даних.

## 3. ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Передумовами вивчення навчальної дисципліни «**Фізичні методи дослідження**» є опанування таких навчальних дисциплін (НД) освітньої програми (ОП):

- ОК 5 Вища математика
- ОК 6 Фізика
- ОК 8 Обчислювальна техніка і основи програмування
- ОК 11 Неорганічна хімія
- ОК 12 Аналітична хімія
- ОК 13 Кристалохімія
- ОК 14 Квантова механіка і квантова хімія

## 4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньої програми «**Хімія**», вивчення навчальної дисципліни повинно забезпечити досягнення здобувачами освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

| <b>Програмні результати навчання</b>                                                                                                                                                     | <b>Шифр ПРН</b> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|
| Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.                                                                                                                                   | ПРН 5           |
| Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.                                                                        | ПРН 8           |
| Аналізувати та оцінювати дані, синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.                                                                                  | ПРН 13          |
| Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.                          | ПРН 15          |
| Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів. | ПРН 16          |
| Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.                                                                                       | ПРН 20          |
| Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.                                                 | ПРН 24.         |

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «**Фізичні методи дослідження**»:

| <b>Очікувані результати навчання з дисципліни</b>                                                                                                                                                                                                       | <b>Шифр ПРН</b> |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|
| Розуміти взаємозв'язок між будовою та властивостями речовин, їх взаємний вплив.                                                                                                                                                                         | ПРН 5           |
| Розуміння принципів і методології фізичних методів аналізу в хімії з використанням відповідного обладнання, їх можливості та обмеження.                                                                                                                 | ПРН 8           |
| Уміння аналізувати та оцінювати одержані експериментальні дані, їх достовірність, адекватність, можливість їх використання для практичних цілей.                                                                                                        | ПРН 13          |
| Набуття навичок використання отриманих знань та умінь для проведення розрахунків для моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.                                                                                          | ПРН 15          |
| Оволодіння навичками застосування комп'ютерних програм, використання стандартного та спеціального програмного забезпечення для обробки результатів фізичних методів з метою одержання даних про структуру речовин та динаміку хімічних процесів.        | ПРН 16          |
| Вміння інтерпретувати експериментально отримані різними фізичними методами дані з використанням відповідних концепцій та теорій у хімії.                                                                                                                | ПРН 20          |
| Вміння самостійно працювати з науковою спеціалізованою літературою в галузі фізичних методів для хімічних досліджень, використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології, пошукові системи для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних. | ПРН 24.         |

## **5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ**

### **Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання**

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

- поточний контроль успішності,
- модульний контроль,
- підсумковий контроль.

#### **Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання**

Поточний контроль реалізується у формі виконання та захисту лабораторних робіт, проведення контрольних робіт, колоквіумів тощо. Модульне контрольне оцінювання проводиться у формі письмової контрольної роботи та/або тестування (комп'ютерного, письмового). Контроль самостійної роботи здійснюється шляхом перевірки виконаних завдань на лабораторних заняттях, захисту лабораторних робіт, написання рефератів, тощо.

#### **Форми поточного контролю:**

- фронтальне усне або письмове опитування за основними питаннями теми заняття у вигляді колоквіуму;
- захист лабораторних робіт;
- перевірка якості виконання завдань для самостійної роботи, зокрема за конспектами матеріалів;
- оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

**Форма модульного контролю:** виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 100-бальною шкалою за кожний модуль.

**Форма підсумкового семестрового контролю:** екзамен (5-й семестр). До екзамену допускаються студенти, які відпрацювали пропущені лабораторні заняття і виконали модульні контрольні роботи.

#### **Розподіл балів, які отримують здобувачі третього рівня вищої освіти (модуль 1)**

| Поточне оцінювання та самостійна робота |    |    |    | Модульна контрольна робота | Сума |
|-----------------------------------------|----|----|----|----------------------------|------|
| T1                                      | T2 | T3 | T4 | 50                         | 100  |
| 10                                      | 15 | 10 | 15 |                            |      |

T1, T2, T3, – теми

#### **Розподіл балів, які отримують здобувачі третього рівня вищої освіти (модуль 2)**

| Поточне оцінювання та самостійна робота |    |    |    |    | Модульна контрольна робота | Сума |
|-----------------------------------------|----|----|----|----|----------------------------|------|
| T1                                      | T2 | T3 | T4 | T5 | 50                         | 100  |
| 15                                      | 15 | 5  | 10 | 5  |                            |      |

T1, T2, T3, T4, T5 – теми

#### **Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни**

| Вид діяльності здобувача вищої освіти             | Модуль 1  |                                       | Модуль 2  |                                       |
|---------------------------------------------------|-----------|---------------------------------------|-----------|---------------------------------------|
|                                                   | Кількість | Максимальна кількість балів (сумарна) | Кількість | Максимальна кількість балів (сумарна) |
| Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист) | 3         | 15                                    | 2         | 10                                    |
| Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні |           |                                       |           |                                       |
| Письмове тестування при тематичному оцінюванні    | 3         | 35                                    | 2         | 40                                    |
| Модульна контрольна робота                        |           | 50                                    |           | 50                                    |
| <b>Разом</b>                                      |           | <b>100</b>                            |           | <b>100</b>                            |

## Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота здійснюється у письмовій формі шляхом відповідей на теоретичні питання, тестові завдання та розв'язування задач. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожний модуль становить 100 балів. Мінімальна кількість балів, за якої робота вважається виконаною, становить 60 балів.

## Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни «Фізичні методи дослідження» здійснюється у виді екзамену. Екзамен проводиться в усній формі шляхом відповіді на питання екзаменаційного білета. Результати екзамену оцінюються за шкалою: «відмінно», «добре», «задовільно», «незадовільно» та у 100-бальній шкалі **ECTS**

Підсумкова оцінка визначається наступними критеріями:

Оцінка *відмінно* (**A**) виставляється, коли студент дає абсолютно правильні відповіді на теоретичні питання з викладенням оригінальних висновків, отриманих на основі програмного, додаткового матеріалу та нормативних документів. При виконанні практичного завдання студент застосовує системні знання навчального матеріалу, передбачені навчальною програмою.

Оцінка *добре* (**B**) виставляється студенту, який повністю розкрив теоретичні питання на основі програмного та додаткового матеріалу. При виконанні практичних завдань студент застосовує узагальнені знання навчального матеріалу, передбачені навчальною програмою.

Оцінка *добре* (**C**) виставляється студенту, який повністю розкрив теоретичні питання, а програмний матеріал викладено у відповідності до вимог. Практичні завдання виконані в цілому правильно, але мають місце окремі неточності.

Оцінка *задовільно* (**D**) виставляється, коли студент розкрив теоретичні питання, проте при викладенні програмного матеріалу допущені окремі помилки. При виконанні практичних завдань студент припускається помилок, за рахунок недостатнього розуміння програмного матеріалу.

Оцінка *задовільно* (**E**) виставляється, коли студент неповністю розкрив теоретичні питання, відповідь містить суттєві помилки. При виконанні практичних завдань студент припускається значних помилок, а виконання завдань викликає значні труднощі у студента.

Оцінка *незадовільно* (**FX**) виставляється студенту, який не розкрив теоретичні питання і не може виконати практичні завдання. Як правило такий студент виявляє здатність до викладення думки лише на елементарному рівні.

Оцінка *незадовільно* (**F**) виставляється студенту, який не виконав навчальну програму або якийсь елемент її складової, має фрагментарні знання, які не дозволяють розкрити теоретичні питання і виконати практичні завдання. Такий студент не може викласти свою думку навіть на елементарному рівні.

### Шкала оцінювання: національна та ECTS

| Сума балів за всі види навчальної діяльності | Оцінка ECTS | Оцінка за національною шкалою для екзамену                 |
|----------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------------------|
| 90 – 100                                     | <b>A</b>    | відмінно                                                   |
| 82-89                                        | <b>B</b>    | добре                                                      |
| 74-81                                        | <b>C</b>    |                                                            |
| 64-73                                        | <b>D</b>    | задовільно                                                 |
| 60-63                                        | <b>E</b>    |                                                            |
| 35-59                                        | <b>FX</b>   | незадовільно з можливістю повторного складання             |
| 0-34                                         | <b>F</b>    | незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни |

## 6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### 6.1. Зміст навчальної дисципліни

#### Модуль 1

**Тема 1 Загальна характеристика фізичних методів дослідження та їх місце серед інших дисциплін.** Місце, роль і значення фізичних методів дослідження в розвитку фундаментальних наук. Пряма і обернена задача методу. Поняття про коректно і некоректно поставлену задачу. Загальна характеристика і класифікація методів. Спектроскопічні, дифракційні, електричні і магнітні методи. Енергетичні характеристики різних методів. Загальна характеристика спектроскопічних методів. Шкала електромагнітних хвиль. Загальна характеристика дифракційних методів. Співвідношення амплітуд розсіювання. Чутливість і роздільна здатність методу. Характеристичний час методу. Інтеграція методів.

**Тема 2. Методи мас-спектрометрії.** Теоретичні основи методу мас-спектрометрії. Методи іонізації молекул, розділення йонів за масами. Методи іонізації: електронний удар, фотоіонізація, неоднорідне електростатичне поле, хімічна іонізація, термоіонізація. Комбіновані методи. Йонний струм і перетин іонізації. Потенціали з'явлення йонів. Дисоціативна іонізація. Типи йонів в мас-спектрометрах. Принципова схема статичного мас-спектрометра Демпстера. Фокусуюча дія однорідного поперечного магнітного поля, електростатичне фокусування, подвійне фокусування. Роздільна здатність мас-спектрометра. Йонне джерело. Система напуску. Принципові схеми динамічних мас-спектрометрів: час-прольотного, квадрупольного, мас-спектрометра йон-циклотронного резонансу.

Застосування мас-спектрометрії. Ідентифікація речовини. Роль роздільної здатності, потенціалів з'явлення, методів іонізації, метастабільних йонів. Співвідношення ізотопів. Кореляція між молекулярною структурою і мас-спектрами. Вимірювання потенціалів з'явлення йонів і визначення потенціалів іонізації й енергії розриву зв'язків, переваги фотоіонізації. Термодинамічні дослідження. Визначення парціальних тисків компонентів газових сумішей. Ефузивна комірка Кнудсена; зв'язок йонного струму з парціальним тиском пари в комірці Кнудсена. Визначення теплоти сублимації, теплоти реакції і константи рівноваги.

**Тема 3. Методи визначення дипольних моментів молекул.** Взаємодія полярної молекули з електростатичним полем. Орієнтаційна поляризація і її зв'язок із діелектричною проникністю і дипольним моментом молекул; рівняння Ланжевена-Дебая. Молекулярна рефракція. Визначення дипольного моменту в газах (перший метод Дебая) і у розчинах (другий метод Дебая).. Метод молекулярних пучків. Дефокусування і зміщення молекулярного пучка в неоднорідному електричному полі. Застосування даних для визначення симетрії і конформації молекул, енергетики внутрішнього обертання і комплексоутворення. Приклади галогенідів другої і третьої груп. Метод електричного резонансу. Визначення дипольних моментів і структури молекул важколетких сполук і нестабільних молекул.

**Тема 4. Основи методів електронної спектроскопії.** Теоретичні основи методу електронної спектроскопії. Характеристики електронних станів багатоатомних молекул: енергія, хвильові функції, мультиплетність, час життя. Класифікація і віднесення електронних переходів. Концепція хромофорів та ауксохромів. Правила добору і порушення заборони. Принцип Франка - Кондона. Інтенсивності смуг різних переходів. Сила осцилятора. Взаємодія випромінювання з речовиною, закон Бугера-Ламберта-Бера.

Абсорбційна спектроскопія у видимій та УФ областях як метод дослідження електронних спектрів багатоатомних молекул. Техніка спектроскопії у видимій й УФ областях. Оптичні методи розкладання випромінювання (заломлення, дифракція), прилади однопроменеві і двопроменеві. Будова монохроматора. Джерела випромінювання, дзеркала, кювети, діапазони випромінювання, роздільна здатність приладу, відтворюваність і точність результатів. Обробка спектрів. Диференціальна та двохвильова спектроскопія. Ізобестична точка. Застосування електронних спектрів поглинання в якісному, структурному і кількісному аналізах. Специфіка електронних спектрів поглинання різних класів сполук.

## Модуль 2

**Тема 1. Основи методів коливальної ІЧ та КР-спектроскопії.** Коливання двохатомної молекули. Рівні енергії, їх класифікація, фундаментальні, обертонні і складові частоти. Класична задача про коливання багатоатомних молекул. Природні і нормальні координати. Нормальні коливання, класифікація нормальних коливань молекули за формою і симетрією. Симетрія нормальних коливань, координати симетрії. Коефіцієнти кінематичної взаємодії. Силкові постійні.

Апаратура і методики ІЧ спектроскопії. Джерела випромінювання, дзеркала, кювети, монохроматори (призми, дифракційні ґратки), детектори ІЧ діапазону. Методи підготовки зразків. Апаратура спектроскопії КР, її особливості, переваги лазерних джерел збудження.

Задачі якісного і кількісного аналізів, що вирішуються методами коливальної спектроскопії. Групові коливання. Аналіз нормальних коливань молекули за експериментальними даними. Зіставлення ІЧ і КР спектрів. Правило альтернативної заборони і висновки про симетрію молекули. Характеристичність нормальних коливань. Обмеження концепції групових частот. Специфічність коливальних спектрів. Дослідження динамічної ізомерії, рівноваги, кінетики реакцій.

**Тема 2. Теоретичні основи методу ядерного магнітного резонансу (ЯМР)** Фізичні основи явища ядерного магнітного резонансу. Зняття виродження спінових станів у постійному магнітному полі. Умова ядерного магнітного резонансу. Заселеність рівнів енергії, насичення, релаксаційні процеси і ширина сигналу. Хімічний зсув і спин-спінове розщеплення в спектрах ЯМР. Константа екранування ядра. Відносний хімічний зсув, його визначення і використання в хімії. Спин-спінова взаємодія ядер, його природа, число компонент мультиплетів, розподіл інтенсивності, правило сум. Аналіз спектрів ЯМР першого і не першого порядків. Метод подвійного резонансу. Застосування спектрів ЯМР у хімії, техніка і методика експерименту. Блок-схема спектрометра ЯМР, типи спектрометрів Протонний магнітний резонанс  $^1\text{H}$  ЯМР, методика експерименту, характер зразків. Магнітний резонанс на ядрах  $^{13}\text{C}$  і структурний аналіз. Хімічна поляризація ядер..

**Тема 3. Основи методу електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).** Теоретичні основи методу ЕПР, g-фактор. Надтонке розщеплення сигналу ЕПР при взаємодії з одним та кількома ядрами. Число компонент в мультиплеті, розподіл інтенсивностей. Тонке розщеплення. Ширина ліній. Використання методу ЕПР в хімії. Вивчення механізмів хімічних реакцій. Хімічна поляризація електронів. Визначення вільних радикалів і інших парамагнітних центрів. Використання спінових міток. Блок-схема спектрометра ЕПР, особливості експерименту. Порівняння методів ЯМР та ЕПР з іншими методами, їх переваги і обмеження.

**Тема 4. Фотоелектронна і рентгеноелектронна спектроскопія.** Загальні принципи одержання фотоелектронних і рентгеноелектронних спектрів. Рентгеноелектронна і фотоелектронна спектроскопія для хімічного аналізу (ЕСХА). Техніка і методики експерименту (апаратура, джерела випромінювання, зразки, стандарти). Структурно-аналітичні аспекти (елементний аналіз, кількісний аналіз, структурна інформація за хімічними зсувами). Метод ЕСХА як безпосередній експериментальний метод вимірювання величини енергії хімічного зв'язку (зв'язок з ефективним зарядом і ступенем окиснення). Можливості ЕСХА для аналізу поверхні твердих тіл.

**Тема 5. Дифракційні методи.** Природа рентгенівських спектрів. Краї поглинання. Взаємозв'язок рентгенівських спектрів поглинання і характеристичних спектрів випромінювання. Залежність частоти переходу країв поглинання або ліній випромінювання від порядкового номера елемента (закон Мозлі). Класифікація рентгенівських методів аналізу. Основи методів рентгенівських дифракційних досліджень. Принципова схема рентгенівського дифрактометра. Рентгенівський фазовий аналіз, його використання для фізико-хімічних досліджень. Особливості методу електронно-дифракційних досліджень. Основи методу нейтронографічних досліджень, його особливості.

## 6.2. Структура навчальної дисципліни

| Назви змістових модулів і тем                                                                  | Кількість годин |                            |             |                         |                      |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|----------------------------|-------------|-------------------------|----------------------|----|
|                                                                                                | Форма навчання: |                            |             |                         |                      |    |
|                                                                                                | Усього          | у тому числі               |             |                         |                      |    |
| лекції                                                                                         |                 | практичні<br>(семінарські) | лабораторні | індивідуальна<br>робота | самостійна<br>робота |    |
| 5-й семестр                                                                                    |                 |                            |             |                         |                      |    |
| Модуль 1                                                                                       |                 |                            |             |                         |                      |    |
| Тема 1. Загальна характеристика фізичних методів дослідження та їх місце серед інших дисциплін | 4               | 2                          |             |                         |                      | 2  |
| Тема 2. Методи мас-спектрометрії                                                               | 8               | 4                          |             |                         |                      | 4  |
| Тема 3. Методи визначення дипольних моментів молекул.                                          | 8               | 2                          |             | 4                       |                      | 2  |
| Тема 4. Основи методів електронної спектроскопії.                                              | 16              | 2                          |             | 8                       |                      | 6  |
| Модульна контрольна робота                                                                     | 2               |                            |             |                         |                      | 2  |
| Разом за модуль                                                                                | 38              | 10                         |             | 12                      |                      | 16 |
| Модуль 2                                                                                       |                 |                            |             |                         |                      |    |
| Тема 1. Основи методів коливальної ІЧ та КР-спектроскопії                                      | 16              | 4                          |             | 4                       |                      | 8  |
| Тема 2. Теоретичні основи методу ядерного магнітного резонансу (ЯМР)                           | 18              | 4                          |             | 4                       |                      | 10 |
| Тема 3. Основи методу електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).                             | 6               | 2                          |             |                         |                      | 4  |
| Тема 4. Фотоелектронна і рентгеноелектронна спектроскопія.                                     | 4               | 2                          |             |                         |                      | 2  |
| Тема 5. Дифракційні методи.                                                                    | 6               | 2                          |             |                         |                      | 4  |
| Модульна контрольна робота                                                                     | 2               |                            |             |                         |                      | 2  |
| Разом за модуль                                                                                | 52              | 14                         |             | 8                       |                      | 30 |
| Разом за семестр                                                                               | 90              | 24                         |             | 20                      |                      | 46 |

## 6.3. Теми лабораторних занять

| № з/п | Назва теми                                                                                                                                                                   | Кількість годин |        |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|--------|
|       |                                                                                                                                                                              | денна           | заочна |
| 1     | Встановлення будови молекули за молекулярною рефракцією                                                                                                                      | 4               |        |
| 2     | Градуювання спектрофотометра за допомогою стандартних розчинів                                                                                                               | 4               |        |
| 3     | Визначення основних характеристик електронних смуг поглинання                                                                                                                | 4               |        |
| 4     | Ідентифікація органічних сполук за їх ІЧ-спектрами поглинання. Структурно-груповий аналіз за ІЧ-спектрами поглинання.                                                        | 4               |        |
| 5     | Ідентифікація органічних сполук за їх ЯМР-спектрами ( $^1\text{H}$ та $^{13}\text{C}$ – спектри) Використання комплексу фізичних методів для встановлення структури молекули | 4               |        |
|       | <b>Разом</b>                                                                                                                                                                 | <b>20</b>       |        |

#### 6.4. Самостійна робота

| № з/п | Назва теми                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | Кількість годин |        |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|--------|
|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | денна           | заочна |
| 1     | Розв'язування задач на знаходження енергетичних характеристик різних методів, їх чутливість, роздільну здатність, характеристичний час методу.                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 2               |        |
| 2     | Розв'язування задач на ідентифікацію речовин за мас-спектрами. Встановлення хімічної будови. Визначення термодинамічних характеристик речовин і реакцій.                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 4               |        |
| 3     | Розрахунки дипольних моментів за даними для першого і другого методів Дебая.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 2               |        |
| 4     | Принципова схема спектроскопічних вимірів у будь-якій області спектра. Основні вузли спектральної установки. Блок-схеми спектрометрів, їхня класифікація. Джерела електромагнітного випромінювання (нагріті тіла, газорозрядні джерела, полум'я, лазери, рентгенівські трубки, $\gamma$ -випромінювачі), конкретні приклади використання різних джерел випромінювання в різних спектральних областях                                             | 2               |        |
| 5     | Монохроматизація випромінювання (монохроматори, поліхроматори, світлофільтри). Характеристики спектральних приладів - роздільна здатність, дисперсія, світлосила, апаратна функція. Приймачі випромінювання (фотоелектричні, лічильники фотонів). Переваги і недоліки фотоелектричних детекторів. Поняття про шуми, різні типи шумів. Реєстрація окремих фотонів (лічильник фотонів)                                                             | 4               |        |
| 6     | Визначення силових полів молекули і проблема їхньої неоднозначності (ІЧ). Використання ізотопних різновидів молекул. Кореляція силових постійних з іншими параметрами і властивостями молекул. Застосування методів коливальної спектроскопії для якісного і кількісного аналізів, специфічність коливальних спектрів. Інші застосування ІЧ-спектроскопії в хімії (дослідження динамічної ізомерії, рівноваги, кінетики реакцій).                | 4               |        |
| 7     | Техніка і методики ІЧ спектроскопії і спектроскопії КР. Апаратура ІЧ спектроскопії: джерела випромінювання, дзеркала, кювети, монохроматори (призми, дифракційні ґратки), детектори ІЧ діапазону, прозорі матеріали, підготування зразків.                                                                                                                                                                                                       | 2               |        |
| 8     | Техніка і методики спектроскопії КР. Апаратура спектроскопії КР (джерела випромінювання, монохроматори, вимоги до зразків); переваги лазерних джерел збудження                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 2               |        |
| 9     | Відносне хімічне зміщення, його визначення і використання в хімії. Спін-спінова взаємодія ядер, число компонент мультиплетів, розподіл інтенсивності, правило сум. Визначення структури молекули за хімічними зсувами і спін-спіновим розщепленням у спектрах ЯМР. Розв'язування задач на ідентифікацію речовин за ЯМР-спектрами. Хімічне зміщення і спін-спінове розщеплення в спектрах ЯМР. Аналіз спектрів ЯМР першого і не першого порядків. | 4               |        |
| 10    | Використання комплексу спектральних методів (мас-спектр, ІЧ-спектр, УФ-спектр, $^1\text{H}$ і $^{13}\text{C}$ ЯМР-спектри) для встановлення будови молекули                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 6               |        |

|    |                                                                                                                                                                                                                                                        |           |  |
|----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|--|
| 11 | Використання методу ЕПР в хімії. Вивчення механізмів хімічних реакцій. Хімічна поляризація електронів. Визначення вільних радикалів і інших парамагнітних центрів. Використання спінових міток. Блок-схема спектрометра, особливості експерименту ЕПР. | 4         |  |
| 12 | Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія (електронна спектроскопія для хімічного аналізу – ЕСХА). Метод ЕСХА як безпосередній експериментальний метод вимірювання величини енергії хімічного зв'язку. Можливості ЕСХА для аналізу поверхонь.         | 2         |  |
| 13 | Закон Брегга. Принципова схема рентгенівського дифрактометра. Рентгенівський фазовий аналіз, його використання для фізико-хімічних досліджень. Особливості методу електронно-дифракційних досліджень. Особливості методу нейтронографічних досліджень  | 4         |  |
| 14 | Модульні контрольні роботи №1 і №2                                                                                                                                                                                                                     | 4         |  |
|    | <b>Разом</b>                                                                                                                                                                                                                                           | <b>46</b> |  |

## **7. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА**

Технічні засоби: Мультимедійний проектор .

Обладнання: електронні ваги AD-200, рефрактометр ИРФ-22, спектрофотометри СФ-18, InSpect UV-1700, стандартне лабораторне обладнання, персональні комп'ютери, ноутбуки.

Програмне забезпечення: Windows 10, програма управління спектрофотометром InSpect UV-1700, MOODLE, Google Meet.

## **8. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ**

### **Основна література**

1. Воловенко Ю.М. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу: підручник / Ю.М. Воловенко, І.В. Комаров, О.В. Туров, В.П. Хилія. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2016. – 703 с.
2. Іщенко О.В. Мас-спектрометрія: підручник / О.В. Іщенко, С.В. Гайдай, О.А. Беда. Київ. нац. ун-т ім. Тараса Шевченка. – К.: Київ. ун-т, 2018. – 244 с.
3. Nakamoto, K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part A (6th ed.), John Wiley and Sons, Inc. 2008. 416 p.
4. Gross J.H. Mass Spectrometry: A Textbook, 3rd Ed. – Springer, 2017. – 986 p.
5. Комаров І.В. Практикум зі спектроскопії ядерного магнітного резонансу: підручник / І.В. Комаров, О.В. Туров. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2009. – 272 с.
6. Фізичні методи дослідження в хімії: навчальний посібник для самостійної роботи (для студентів спеціальності «Хімія» хімічного факультету / уклад.: М.М. Олійник, М.В. Горічко, О.М. Швед та ін. – Вінниця: ДонНУ, 2015. – 198 с.

### Допоміжна література

1. Badertscher M., Bühlmann P., Pretsch E. Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data; 4th, revised and enlarged edition: Springer Verlag, 2009. – 433 p
2. Beynon, J.H. Mass and Abundance Tables for Use in Mass Spectrometry. / Beynon, J.H. and Williams, A.E.: Elsevier Publishing Company, Amsterdam / London / New York, 1963.
3. Кохан О.П. Методичні вказівки до проведення лабораторних робіт з курсу “Фізичні методи дослідження в хімії” Ужгород, 2018. – 56 с.
4. Кохан О.П., Сливка М.В., Сабов М.Ю. Лендел В.Г. Фізико-хімічні методи дослідження. Протонний магнітний резонанс. (Збірник задач). Частина 1. Ужгород, 2004. Вид-во УжНУ. – 57 с.

### Інформаційні ресурси в мережі Інтернет

1. [www.nbu.gov.ua](http://www.nbu.gov.ua) (бібліотека ім.В.І.Вернадського)
2. <http://riodb.ibase.aist.go.jp/riohomee.html> (бази даних спектрів ІЧ, КР, ЯМР, мас-спектрів неорганічних та органічних речовин)
3. <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/245>
4. <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/244>
5. <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/12660>

**Результати перегляду  
робочої програми навчальної дисципліни**

Робоча програма перезатверджена на 20 \_\_/20\_\_ н.р. без змін; зі змінами (Додаток \_\_)  
(потрібне підкреслити)

протокол № \_\_ від «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.    Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ (І.Є.Барчій)

Робоча програма перезатверджена на 20 \_\_/20\_\_ н.р. без змін; зі змінами (Додаток \_\_)  
(потрібне підкреслити)

протокол № \_\_ від «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.    Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ (І.Є.Барчій)

Робоча програма перезатверджена на 20 \_\_/20\_\_ н.р. без змін; зі змінами (Додаток \_\_)  
(потрібне підкреслити)

протокол № \_\_ від «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.    Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ (І.Є.Барчій)

Робоча програма перезатверджена на 20 \_\_/20\_\_ н.р. без змін; зі змінами (Додаток \_\_)  
(потрібне підкреслити)

протокол № \_\_ від «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.    Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ (І.Є.Барчій)