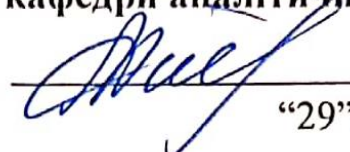


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені ІВАНА ФРАНКА
Кафедра аналітичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”
Завідувачка кафедри аналітичної хімії

 Л.О. Дубенська
“29” серпня 2023 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

освітній рівень	бакалавр
галузь знань:	10 Природничі науки
спеціальність:	102 Хімія
освітня програма	Хімія, освітньо-наукова програма
факультет:	хімічний

Робоча програма навчальної дисципліни **“Фізичні методи дослідження”** для студентів спеціальності 102 Хімія.

Розробник програми:

доцент кафедри аналітичної хімії Пацай І.О.

Робочу програму схвалено на засіданні кафедри аналітичної хімії.

Протокол № 1 від "29" серпня 2023 року.

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 3,0	Галузь знань 10 Природничі науки (шифр, назва)	Нормативна (за вибором студента)	
Модулів – 1	Спеціальність 102 “Хімія” (шифр, назва)	Рік підготовки:	
Змістових модулів – 2	Спеціальність –	3-й	–
Курсова робота –		<i>Семестр</i>	
Загальна кількість годин – 90		6-й	–
		<i>Лекції</i>	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 4 самостійної роботи – 1,625	Освітньо-кваліфікаційний рівень: БАКАЛАВР	32 год	–
		<i>Практичні, семінарські</i>	
		–	–
		<i>Лабораторні</i>	
		32 год	–
		<i>Самостійна робота</i>	
		26 год	–
		ІНДЗ: –	
Вид контролю: іспит			

Примітка.

Частка аудиторних занять до загальної кількості годин становить 71 %

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета – засвоєння студентами основних теоретичних положень методів ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії, одержання практичних навичок з інтерпретації відповідних спектрів і їх використання для встановлення складу і будови хімічних сполук.

Завдання – розглянути та засвоїти основні принципи ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії; хімічні об'єкти, які можуть бути досліджені цими методами

В результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: характеристики, особливості та можливості практичного використання основних фізичних методів дослідження – ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії;

вміти: здійснювати інтерпретацію спектрів ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії; розв'язувати типові задачі.

В результаті успішного проходження курсу студент набуде **загальні компетентності:**

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

та спеціальні **фахові компетентності:**

СК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

СК 2. Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.

СК 4. Здатність до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії.

СК 10. Здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання.

Програмні результати навчання (ПРН):

ПР01. Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.

ПР05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.

ПР08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.

3. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1

Тема 1. ЗАГАЛЬНІ ОСНОВИ ФІЗИЧНИХ МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

1.1. Класифікація та характеристика методів

Спектроскопічні, дифракційні та інші методи. Класифікація методів. Пряме і обернене завдання методу. Коректно і некоректно поставлене завдання. Характеристичний час, чутливість і роздільна здатність методу. Значення фізичних методів для хімії. Інтеграція, сучасний рівень і перспективи розвитку ФМД.

1.2. Взаємодія випромінювання з речовиною

Природа електромагнітного випромінювання (ЕМВ). Оптичні явища, основою яких є хвильова і корпускулярна природа ЕМВ. Рівняння Планка, енергетичний спектр фотонів. Інтенсивні та екстенсивні параметри випромінювання. Спектр ЕМВ, його ділянки. Спектроскопічні методи на основі використання випромінювання окремих спектральних ділянок.

Енергія молекул, абсорбція та емісія випромінювання. Форми молекулярної енергії. Квантування енергії. Енергетичний розподіл молекул в стані термічної рівноваги. Функція і ймовірність розподілу, заселеність енергетичних рівнів та інтенсивність спектральних смуг.

Ймовірність абсорбції та емісії випромінювання. Спонтанні та вимушені (стимульовані, індуковані) переходи. Коефіцієнти Айнштейна. Коефіцієнт Айнштейна для адсорбції випромінювання і момент переходу. Правила відбору у молекулярній спектроскопії.

Фактори, які впливають на форму і ширину спектральних смуг. Спектральні лінії та смуги, їх параметри. Натуральна ширина спектральних ліній і співвідношення невизначеностей Гайзенберга. Ефект Доплера. Характеристичні причини розширення смуг. Апаратурна функція. Контур смуги, функції Лоренца і Гауса. Параметри смуги. Спектральний фон, апаратурний шум.

Види спектроскопії. Критерії поділу на окремі види (методи): поглинання, випромінювання чи розсіювання фотонів; форми молекулярної енергії; спектральна ділянка ЕМВ.

1.3 Застосування перетворення Фур'є у спектроскопії

Аналіз явищ у частотних і часових категоріях. Перетворення часових функціональних залежностей у частотні. Принципові відмінності традиційної реєстрації спектру від комп'ютеризованої на основі перетворення Фур'є. Можливості Фур'є-спектроскопії та її переваги порівняно з традиційною спектроскопією.

Тема 2. СИМЕТРІЯ МОЛЕКУЛ

Значення симетрії для розв'язку спектроскопічних проблем. Якісний та кількісний опис симетрії. Точкові групи симетрії. Символіка для точкових груп. Послідовність (алгоритм) для встановлення точкової групи. Еквівалентні операції симетрії та еквівалентні атоми. Незміщені атоми. Добуток (комбінація) операцій симетрії. Генератори точкових груп. Симетрія та оптична активність. Симетрія та дипольний момент молекули.

Кількісний опис симетрії на основі теорії груп. Сукупність операцій симетрії точкової групи як математична група. Таблиця групового множення. Порядок групи,

число класів та порядок класу. Математичні представлення операцій симетрії. Характери операцій симетрії (представлень). Незвідні та звідні представлення. Типи незвідних представлень. Символіка незвідних представлень в хімії та спектроскопії. Незвідні представлення – типи симетрії (симетрія) відповідних базисів (хвильових функцій орбіталей, електронних та інших станів, операторів, інтегралів перекривання тощо). Звідні представлення, їх розклад. Таблиці характерів, використання у спектроскопії.

Тема 3. МІКРОХВИЛЬОВИЙ МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ ОБЕРТАЛЬНИХ СПЕКТРІВ МОЛЕКУЛ

3.1 Обертальна енергія молекули як частина кінетичної енергії молекули

Жорсткий ротатор. Кінетична енергія обертального руху. Момент інерції та зведена маса. Обертальне квантове число і енергія молекули. Обертальна стала. Обертальні енергетичні рівні. Температурна залежність заселеності обертальних енергетичних рівнів.

Взаємодія випромінювання з молекулами, які обертаються. Правила відбору. Характер і параметри обертальних спектрів. Спектри двохатомних і багатоатомних лінійних молекул. Відношення частот та інтенсивностей смуг у спектрі. Нелінійні багатоатомні молекули. Моменти інерції та симетрія молекул. Основні типи молекул. Енергія ротатора типу симетричної дзиги, частоти і правила відбору. Молекули типу асиметричної дзиги. Ступінь асиметрії, енергетичні обертальні рівні та правила відбору для молекул цього типу. Спектральні переходи: Q-, R- і P-вітки. Вплив коливань на обертальні сталі.

3.2 Застосування обертальної спектроскопії

Методика експерименту. Загальна блок-схема радіоспектрометра. Клістрон. Ефект насичення. Структурні дослідження та визначення довжин зв'язків. Ізотопне заміщення. Методи розрахунку геометричних параметрів молекул. Нестійкі молекули. Імпульсна Фур'є-спектроскопія в мікрохвильовій області. Розщеплення вироджених обертальних рівнів в електричному полі (ефект Штарка) і вимірювання дипольного моменту молекул в різних коливальних і електронних станах.

Тема 4. КОЛИВАЛЬНА СПЕКТРОСКОПІЯ

4.1 Основи методів коливальної спектроскопії

Модель гармонійного осцилятора. Силова стала. Коливальна енергія молекул. Коливальне квантове число. Потенціальна енергія ангармонійного осцилятора. Коефіцієнт ангармонійності. Енергетичні терми, криві потенціальної енергії та квантове правило відбору для гармонійного та ангармонійного осцилятора. Функція Морса. Фундаментальна частота (основний тон) і обертони (надтони). Температурна залежність заселеності коливальних рівнів. "Гарячі" смуги.

Спектральні характеристики. Нормальні коливання. Частоти, силові сталі і амплітуди відхилень в наближенні гармонійного і ангармонійного осцилятора для двохатомної молекули. Багатоатомна молекула, внутрішні координати та силові сталі. Розрахунок коливальних частот і силових сталих. Метод Вільсона, кінематичні та динамічні коефіцієнти, секулярне рівняння. Розв'язок оберненого завдання коливальної спектроскопії. Модель поля сил, валентно-силові схеми. Нормальні координати. Нормальні коливання. Взаємозв'язок нормальних і внутрішніх координат, власні вектори. Типи нормальних коливань. Симетрія нормальних коливань. Види переходів. Фундаментальні (основні) обертольні та

комбінаційні (складові) частоти. Резонанс Фермі. Внутрішньомолекулярне та міжмолекулярне спряження.

4.2 Абсорбційна коливальна спектроскопія (ІЧ-спектроскопія)

Ймовірність абсорбції випромінювання. Коливальна хвильова функція, момент переходу, коефіцієнт Айнштайна для абсорбції випромінювання. Правило відбору за зміною дипольного моменту. Інтенсивність смуг. Коефіцієнти поглинання. Перпендикулярні та горизонтальні смуги. Правило відбору за симетрією.

4.3 Спектроскопія комбінаційного розсіювання світла (КР)

Поляризованість молекул. Релеєвське розсіювання. Теорія поляризованості. Комбінаційне розсіювання. Інтенсивність КР. Момент переходу в КР спектрах. Правила відбору за зміною поляризованості, симетрією, правило альтернативної заборони. Поляризовані та деполаризовані смуги (частоти) в спектрах КР. Резонансне та інверсійне КР. Методи нелінійної спектроскопії КР.

Теоретико-груповий аналіз нормальних коливань. Визначення характеристик повного представлення, його розклад і аналіз одержаних даних. Альтернативний вибір структури на основі співставлення результатів теоретико-групового аналізу з експериментальними даними.

Коливально-обертальні спектри. Енергетичні рівні і структура коливально-обертальної смуги. Правила відбору. Інформативність спектрів.

4.4 Застосування коливальної спектроскопії

Структурно-груповий аналіз. Концепція групових чи характеристичних частот. Наближені критерії характеристичності. Змішування коливань. Бар'єрний ефект важкого атома і локальна симетрія. Динамічні характеристики і коливальні частоти. Міжмолекулярні асоціати та комплекси. Вплив внутрішньомолекулярного та міжмолекулярного водневого зв'язку, спряження кратних зв'язків. Обмеження концепції. Ідентифікація функціональних груп, компонентів сумішей. Особливості характеристичних частот і "відбитків пальців". Кореляційні таблиці, банки даних. Особливості застосування концепції групових частот.

Структурно-спектральні кореляції. Прогнозування спектрів ймовірних структур. Кореляції силових сталих з енергією, довжиною та кратністю зв'язку, його хімічним оточенням та характером. Застосування коливальної спектроскопії для дослідження неорганічних сполук і координаційних сполук, кінетики реакцій та рівноважних процесів. Можливості методів якісного і кількісного аналізу.

4.5 Апаратура і методика експерименту

Будова та дія ІЧ-спектрометрів. Джерела ІЧ-випромінювання, диспергуючі засоби. Фур'є-спектрометри, прилади з перетворенням Адамара. Оптичні матеріали для ІЧ-спектроскопії. Підготовка зразків. Вибір розчинника, види кювет. Методика з набуванням полімерних плівок. Таблетки з наповнювачами, суспензії у імерсійних середовищах, плівки на прозорих підкладках і з розплавів. Порушене повне внутрішнє відбиття (ППВВ). Багатократне ППВВ. Елементи ППВВ, можливості методу. Техніка і методика спектроскопії КР. Апаратура, джерела опромінювання. Лазери, мікросонд і метод лазерної мікрографії. Типи кювет.

Змістовий модуль 2

Тема 1. МЕТОДИ ЕЛЕКТРОННОЇ УФ-, ВИДИМОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ

1.1 Основи теорії електронних спектрів молекул

Властивості електронних станів: енергія, хвильова функція, ступінь виродження, час життя і симетрія. Класифікація, номенклатура і символіка електронних станів молекул. Симетрія електронного стану. Номенклатура і символіка за симетрією.

Електронні переходи. Переходи за Каша, Малікеном, за мультиплетністю та симетрією. Рідбергівські переходи. Переходи і комплекси з переносом заряду. Типи переходів у координаційних сполуках.

Концепція хромофорів і ауксохромів. Основні типи хромофорних угруповань, оцінювання характеристичності поглинання. К-, R- і В-хромофори. Спряжені хромофори. Вплив ауксохромів на поглинання хромофорів. Спектральні зсуви та ефекти. Сольватохромний ефект.

Інтенсивність електронних переходів. Характеристики електронних смуг. Сила осцилятора, її зв'язок з коефіцієнтами поглинання. Інтенсивність, як міра ймовірності переходів, коефіцієнти Айнштейна. Момент переходу та інтенсивність поглинання.

Правила відбору. Загальне правило відбору. Правило одноелектронного переходу. Спіновий відбір. Правило відбору за симетрією. Правило Лапорта. Принцип Франка-Кондона. Вібронне правило відбору.

1.2 Застосування абсорбційної електронної спектроскопії

Структурно-спектральні кореляції. Встановлення природи смуг у спектрах. Емпіричні правила Вудворда і Фізера. УФ-спектри насичених, ненасичених, карбонільних і окремих видів азотовмісних органічних сполук, бензолу та його заміщених. Дослідження цис- і транс-ізомерії, таутомерних перетворень, стеричних ефектів. Визначення констант дисоціації.

УФ-спектри неорганічних і комплексних сполук. Дослідження складу та стійкості комплексних сполук. Якісний та кількісний аналіз, кінетичні дослідження.

1.3 Емісійна електронна спектроскопія

Види люмінесценції. Схема нижчих енергетичних рівнів молекули і переходів між ними при фотолюмінесценції. Радіаційні переходи. Флуоресценція і фосфоресценція. Коливальна релаксація, внутрішня та інтеркомбінаційна конверсія. Ймовірність спонтанного переходу. Реальний час життя збудженого стану, його залежність від швидкостей різних процесів. Закон Стокса-Ломеля. Правило дзеркальної симетрії. Вихід люмінесценції: енергетичний і квантовий. Гасіння люмінесценції. Сенсibilізована фотолюмінесценція. Хемілюмінесценція і процеси, що супроводжуються нею. Хемілюмінесцентні субстрати. Застосування люмінесценції в хімії, біології та медицині.

1.4 Апаратура і методика електронної спектроскопії

Принципи будови і дії спектрофотометрів. Оптична схема, джерела і монохроматизація випромінювання. Детектори випромінювання і реєструючі системи. Автоматизація на основі ЕВМ. Види кювет, підготовка зразків. Спектроскопія з диференціюванням, різницева і двопроменева спектрофотометрія.

Методика фотолюмінесценції. Джерела збудження, застосування лазерів. Оптичні матеріали. Схема спектрофлуориметра. Термостатуючі пристрої, спеціальні кріостати для реєстрації спектрів фосфоресценції. Види кювет, підготовка зразків. Вимірювання хемілюмінесценції. Схема хемілюмінометра.

Тема 2. МЕТОДИ МАГНІТНОЇ РЕЗОНАНСНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ

2.1 Взаємодія магнітного поля з речовиною

Магнітні характеристики. Наведена магнітна індукція. Індукований магнітний дипольний момент, магнітна сприйнятливість. Індукційне намагнічування. Речовини, що містять частинки з постійним дипольним моментом, у магнітному полі. Температурна залежність орієнтаційної сприйнятливості. Стала Кюрі. Магнітна поляризація речовини. Діамагнетики, парамагнетики, феромагнетики, антиферомагнетики і ферімагнетики.

Магнітний момент електрона. Магнетон Бора. Зв'язок між магнітним моментом і спіном електронів. Орбітальний магнітний момент. Гіромагнітне відношення, гіромагнітний коефіцієнт. Рівняння Ланде. Розщеплення спінових енергетичних рівнів, різниця енергії рівнів. Коефіцієнт спектроскопічного розщеплення.

Магнітний момент ядра. Спін ядра, його залежність від нуклонного і протонного числа. Ядерний магнетон. Гіромагнітне відношення, ядерний g-фактор. Квантування спінових станів. Магнітне квантове число, дискретні стаціонарні стани. Взаємодія магнітного моменту з магнітним полем.

2.2 Магнітний резонанс

Умови резонансу. Правила відбору для спінових переходів. Рівноважна заселеність енергетичних рівнів для електрона і протону. Способи досягнення умов резонансу. Порядок значень різниці енергій спінових станів ядер і неспареного електрона в магнітних полях і резонансні частоти.

2.3 Ядерний магнітний резонанс

Екранування ядра і хімічний зсув. Механізм і стала екранування ядра. Діамагнітне екранування. Парамагнітний ефект. Хімічний зсув: абсолютний і відносний. Еталони (стандарти) для хімічного зсуву: тетраметилсилан та ін. Шкали хімічного зсуву. Спектри ЯМР низького розділення. Хімічно еквівалентні і нееквівалентні ядра. Характеристичність хімічних зсувів. Хімічні зсуви протонів органічних сполук в ПМР-спектрах. Хімічні зсуви у ЯМР-спектрах інших магнітних ядер. Емпіричні закономірності, таблиці та кореляційні діаграми хімічних зсувів. Напівемпіричні співвідношення між хімічним зсувом і молекулярною структурою. Зовнішні впливи на хімічний зсув. Температура, концентрація речовини, природа розчинника, зміщення за рахунок розчинника. Парамагнітні зміщення.

Спін-спінова взаємодія. Пряма і непряма спін-спінова взаємодія. Мультиплікативні функції. Вироджені стани. Механізм та енергія спін-спінової взаємодії. Правила відбору. Магнітна еквівалентність ядер. Константа спін-спінової взаємодії, властивості і знак константи. Види констант. Число компонент і відношення інтенсивностей у мультиплетному сигналі. Трикутник Паскаля. Особливості спектрів першого порядку. Фундаментальне правило ЯМР. Типи спінових систем. Способи спрощення складних спектрів. Методи подвійного резонансу.

Релаксаційні процеси. Суть, механізм і часи релаксаційних процесів, спін-спінова і спін-граткова релаксація. Процес насичення. Спектри широких ліній і високого розділення. Ларморова прецесія. Спад вільної індукції, рівняння Блоха.

Застосування ЯМР-спектроскопії. Структурні дослідження. Адитивні схеми, емпіричні співвідношення і таблиці інкрементів. Метод аналогій і модельних сполук. Діастереотопія ядер. Водневий зв'язок і хімічний обмін протонів. Внутрішнє обертання. Фізико-хімічні застосування. Кореляційні співвідношення, дослідження інтермедіатів, кінетики та механізмів реакцій, рівноважних перетворень і обмінних процесів. Хімічна поляризація ядер. Якісний і кількісний аналіз. ЯМР-томографія.

Апаратура і методика ЯМР. Принцип дії апаратури. Спектрометри стаціонарного типу. Застосування імпульсної Фур'є-спектроскопії ЯМР. Реєстрація спектрів подвійного резонансу. Зразки, стандарти, розчинники.

2.4 Електронний парамагнітний резонанс

Види парамагнітних центрів. Положення резонансного сигналу і

g-фактор. Електрон-ядерна взаємодія і надтонка структура спектру ЕПР. Електрон-електронна взаємодія і тонка структура спектрів ЕПР анізотропних систем. Інтенсивність, ширина і форма ліній. Релаксаційні процеси. Застосування спектроскопії ЕПР. Структурні, кінетичні та інші дослідження. Техніка і експериментальні методики ЕПР.

Тема 3. МАС-СПЕКТРОСКОПІЯ

Процеси іонізації і типи іонів. Способи фрагментації молекул. Методи іонізації речовин. Принципові схеми мас-спектрометрів. Магнітний мас-спектрометр, характеристики мас-спектрометра. Динамічні мас-спектрометри. Ізотопи і мас-спектр. Застосування мас-спектроскопії. Ідентифікація і встановлення будови речовин. Визначення потенціалів іонізації молекул і появи іонів. Термодинамічні та кінетичні дослідження. Аналітична мас-спектроскопія, хроматомас-спектроскопія.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	К-сть год (денна форма)				
	Усього	в тому числі			
		лк	лб	пр	сп
Модуль 1					
Змістовий модуль 1. Вступ, загальна характеристика фізичних методів дослідження, симетрія молекул, методи коливальної спектроскопії					
Тема 1. Загальні основи фізичних методів дослідження	6	2	2	–	2
Тема 2. Симетрія молекул	13	4	4	–	5
Тема 3. Мікрохвильовий метод дослідження обертальних спектрів молекул	7	2	2	–	3
Тема 4. Коливальна спектроскопія	19	8	8	–	3
Усього за змістовим модулем	45	16	16	–	13
Змістовий модуль 2. Електронна спектроскопія, методи магнітного резонансу, мас-спектроскопія					
Тема 5. Методи електронної УФ-, видимої спектроскопії	14	6	6	–	4
Тема 6. Методи магнітної резонансної спектроскопії	24	8	8	–	6
Тема 7. Мас-спектроскопія	7	2	2	–	3
Усього за змістовим модулем	45	16	16	–	13
РАЗОМ	150	32	32	–	26

5. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	К-сть годин
1	Характеристики електромагнітного випромінювання, заселеність енергетичних рівнів, розподіл Больцмана, ефективність перетворення світлової енергії в акумульовану хімічну	2
2	Визначення точкової групи симетрії молекул	2
3	Розклад звідних представлень	2
4	Розрахунок міжятомної віддалі за даними обертальної спектроскопії	2
5	Аналіз за симетрією нормальних коливань молекули	4
6	Інтерпретація ІЧ спектрів	4
7	Дозволеність електронних та вібронних переходів за симетрією та мультиплетністю	6
8	Передбачення та інтерпретація спектрів ПМР, спин-спінова взаємодія	8
9	Інтерпретація мас-спектрів	2
РАЗОМ		32

6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	К-сть годин
1	Загальні основи фізичних методів дослідження	2
2	Симетрія молекул	5
3	Мікрохвильовий метод дослідження обертальних спектрів молекул	3
4	Коливальна спектроскопія	3
5	Методи електронної УФ-, видимої спектроскопії	4
6	Методи магнітної резонансної спектроскопії	6
7	Мас-спектроскопія	3
РАЗОМ		26

7. Методи навчання, контролю та розподіл балів

Методи навчання під час викладання курсу: пояснення, розповідь, лекція, бесіда, робота з друкованими та електронними навчальними матеріалами; ілюстрування, демонстрування, самостійне спостереження, вправи, лабораторні роботи, навчальна дискусія, створення проблемної ситуації у процесі викладання, створення ситуації новизни.

Поточний контроль включає оцінювання виконання лабораторних занять, їх оформлення та захист, здачу письмових модульних робіт. Розподіл проводиться за 100-бальною шкалою:

№ з/п	Форми контролю	К-сть	Макс. балів	Разом балів
1	Виконання лабораторних робіт, їх оформлення та захист	8	3	24
2	Письмова модульна робота	2	13	26
3	Письмовий іспит	1	50	50
РАЗОМ				100

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Оцінка ЄКТС	Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка за національною шкалою
A	90-100	<i>відмінно</i>
B	81-89	<i>добре</i>
C	71-80	
D	61-70	
E	51-60	<i>задовільно</i>
FX	21-50	<i>незадовільно із можливістю повторного складання</i>
F	0-20	<i>незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни</i>

Типові практичні завдання у письмових модульних роботах та іспиті

1. Кількісні характеристики електромагнітного випромінювання. Перерахунок одних величин в інші.
2. Розподіл Больцмана. Розрахунок відносної заселеності квантових станів частинок за різної температури.
3. Пошук елементів симетрії та визначення точкової групи молекули.
4. Аналіз за симетрією нормальних коливань молекули.
5. Інтерпретація ІЧ спектрів органічних сполук.
6. Розрахунок "натуральної ширини" спектральної лінії атома.
7. Розрахунок параметрів електромагнітного випромінювання, необхідного для стійкого перебігу фотохімічної реакції на основі її енергії активації.
8. Визначення дозволених електронних переходів за симетрією та мультиплетністю.
9. Умови реалізації вібронних переходів.
10. Схематичне відображення спектрів ПМР першого порядку з врахуванням спін-спінової взаємодії.
11. Інтерпретація спектрів ПМР.
12. Схематичне відображення спектрів ПМР першого порядку для систем типу АМХ з врахуванням спін-спінової взаємодії.
13. Розрахунок міжатомної віддалі у двохатомних молекулах на основі мікрохвильового (обертального) спектра.
14. Інтерпретація мас-спектрів.

9. Рекомендована література

Основна

1. Литвин Б.Л., Романюк А.Л. Фізичні методи дослідження органічних речовин: навч.-метод. посібник. – Івано-Франківськ: Прикарп. нац. ун-т. ім. В. Стефаника, 2003. – 118 с.
2. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс. – К.: Перун, 2007, – 480 с.

3. Умрихіна Л.К., Єрупсанова Т.В. Фізичні методи дослідження органічних речовин. Навчальний посібник. – Кіровоград.: РВЦ КДПУ ім. В.Винниченк, 2002.
4. Скоробогатий Я.П. Фізико-хімічні методи аналізу. Підручник. Львів: „Каменяр”, 1993. 164 с.
5. Зінчук В.К., Левицька Г.Д., Дубенська Л.О. Фізико-хімічні методи аналізу. – Львів.: Видавн. центр ЛНУ ім. І. Франка, – 2008 – 363 с.

Додаткова

1. S. Huettel, A. Song, G. McCarthy. Functional Magnetic Resonance Imaging. – Sinauer Associates, 2004. - 492 p.
2. R. Silverstein, F. Webster, D. Kiemle. Spectrometric Identification of Organic Compounds. - Wiley, 2005. - 512 p.
3. H. Friebolin. Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy. - Wiley-VCH, 2005. - 430 p.
4. B. Stuart. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. - Wiley, 2004. - 224 p.
5. E. Hoffmann, V. Stroobant. Mass Spectrometry: Principles and Applications. 3rd Edition. - Wiley-Interscience, 2007. - 512 p.

Інформаційні ресурси

1. <http://ltft.kpi.ua/ua/2-uncategorised/169-fizychni-metody-doslidzhen.html>
2. <https://eduportal.kau.org.ua/course/view.php?id=11>
3. <https://chem.lnu.edu.ua/course/fizychni-metody-doslidzhennya>
4. <https://chemistry.snu.edu.in/content/physical-methods-chemistry>