

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Хімічний факультет
Кафедра аналітичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Завідувачка кафедри аналітичної хімії



Л.О. Дубенська

“29” серпня 2023 року

Силабус з навчальної дисципліни
«Фізичні методи дослідження»,
що викладається в межах ОПІ першого (бакалаврського) рівня
вищої освіти для здобувачів із спеціальності
102 Хімія

Львів 2023 р.

Назва дисципліни	Фізичні методи дослідження
Адреса викладання дисципліни	м. Львів, вул. Кирила і Мефодія 6
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний факультет, кафедра аналітичної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Природничі науки, 102 Хімія
Викладачі дисципліни	Пацай Ігор Орестович, кандидат хімічних наук, доцент кафедри аналітичної хімії
Контактна інформація викладачів	ihor.patsay@lnu.edu.ua, https://chem.lnu.edu.ua/employee/patsaj-ihor-orestovych , Хімічний факультет, кафедра аналітичної хімії, каб. 206 тел. +38022394047
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	Консультації в день проведення лекцій/лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі онлайн консультації через MS Teams. Для погодження часу он-лайн консультацій слід писати на електронну пошту викладача.
Сторінка курсу	http://chem.lnu.edu.ua/course/fizychni-metody-doslidzhennya
Інформація про дисципліну	Предметом вивчення навчальної дисципліни є основні фізичні методи, які використовують для дослідження будови хімічних речовин та їхніх реакцій: спектральні методи (мікрохвильова оберտальна спектроскопія, інфрачервона та раманівська спектроскопія, електронна спектроскопія), методи магнітного резонансу та мас-спектрометрія. Значну увагу приділено вивченню аспектів точкової симетрії молекул та опису їхньої будови в термінах точкових груп симетрії. Розглянуто математичний апарат аналізу за симетрією нормальних коливань молекул.
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна є нормативною зі спеціальності 102 Хімія для освітнього рівня Бакалавр хімії, яка викладається у VI семестрі в обсязі 3 кредитів (90 год за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Мета та цілі дисципліни	Метою викладання навчальної дисципліни є 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. Цілі вивчення дисципліни – розглянути та засвоїти основні принципи ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії; хімічні об'єкти, які можуть бути досліджені цими методами
Література для вивчення дисципліни	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: „Каменярь”, 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.

	<p style="text-align: center;">Додаткова</p> <ol style="list-style-type: none"> 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. <p style="text-align: center;">Інформаційні ресурси</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. http://lftf.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
Обсяг курсу	90 годин. З них 32 годин лекцій, 32 годин лабораторних занять та 26 годин самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цього курсу студент буде</p> <p>Знати: характеристики, особливості та можливості практичного використання основних фізичних методів дослідження – ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектрометрії.</p> <p>Вміти: здійснювати інтерпретацію спектрів ЯМР, ІЧ, електронної, ЕПР і мас-спектроскопії; розв'язувати типові задачі.</p> <p>В результаті успішного проходження курсу студент набуде загальні компетентності:</p> <p>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.</p> <p>та спеціальні фахові компетентності:</p> <p>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.</p> <p>Програмні результати навчання (ПРН):</p> <p>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.</p>
Ключові слова	Ядерний магнітний резонанс, інфрачервона спектрометрія, електронна спектрометрія, спектрометрія комбінаційного розсіювання, мас-спектрометрія.
Формат курсу	Очний

	Проведення лекцій, лабораторних занять та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у Таблиці 1
Підсумковий контроль, форма	Письмовий іспит в кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з дисциплін "Аналітична хімія", "Фізика ", "Органічна хімія", достатніх для сприйняття категоріального апарату та розуміння джерел
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися 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.
Необхідне обладнання	<ul style="list-style-type: none"> - мультимедійний проектор; - проекторний екран; - ноутбук; - ІЧ-спектрофотометр Specord-75IR; - Рентгенівський дифрактометричний комплекс STOE Transmission Diffractometer System STADI P; - Скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega 3 LMU, оснащений стандартним SE детектором вторинних електронів та детектором зворотно розсіяних електронів BSE; - Скануючий спектрофотометр HACH-DR 400; - Скануючий спектрофотометр Spekord-M40 – 1 шт; - Програмне забезпечення "NMR ¹H simulator AMX" (власне виробництво, безліцензійна версія з необмеженим використанням для навчальних цілей).
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • лабораторні/самостійні тощо : 24% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 24 • контрольні заміри (модулі): 26% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 26 • іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50 <p>Підсумкова максимальна кількість балів 100</p> <p>Політика виставлення балів. Враховуються бали набрані на поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час лабораторного заняття; недопустимість пропусків та запізнень на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях не пов'язаних з навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
Питання до екзамену	<p>Класифікація та характеристика фізичних методів дослідження.</p> <p>Взаємодія випромінювання з речовиною.</p> <p>Застосування перетворення Фур'є у спектроскопії.</p> <p>Значення симетрії для розв'язку спектроскопічних проблем.</p> <p>Симетрія молекул, елементи та операції симетрії. Точкові групи симетрії.</p> <p>Кількісний опис симетрії на основі теорії груп.</p>

	<p>Обертальна енергія молекули як частина кінетичної енергії молекули. Обертання молекул в наближенні моделі жорсткого ротатора. Обертальні переходи у молекулах. Застосування оберտальної спектроскопії. Основи методів коливальної спектроскопії. Абсорбційна коливальна спектроскопія (ІЧ-спектроскопія). Спектроскопія комбінаційного розсіювання світла. Застосування коливальної спектроскопії. Апаратура методів коливальної спектроскопії і методика експерименту. Основи теорії електронних спектрів молекул. Застосування абсорбційної електронної спектроскопії. Емісійна електронна спектроскопія. Апаратура і методики електронної спектроскопії. Взаємодія магнітного поля з речовиною. Ядерний магнітний резонанс. Електронний парамагнітний резонанс. Мас-спектроскопія.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1. Схема курсу

Тиждень	Тема, план, короткі тези	Форма діяльн.	Література
1	Загальні основи фізичних методів дослідження	1 лк	<p>Основна</p> <p>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.</p> <p>2. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс. – К.: Перун, 2007, – 480 с.</p> <p>3. Умрихіна Л.К., Єрупсанова Т.В. Фізичні методи дослідження органічних речовин. Навчальний посібник. – Кіровоград.: РВЦ КДПУ ім. В.Винниченк, 2002.</p> <p>4. Скоробогатий Я.П. Фізико-хімічні методи аналізу. Підручник. Львів: „Каменярь”, 1993. 164 с.</p> <p>5. Зінчук В.К., Левицька Г.Д., Дубенська Л.О. Фізико-хімічні методи аналізу. – Львів.: Видавн. центр ЛНУ ім. І. Франка, – 2008 – 363 с.</p> <p>Додаткова</p> <p>1. S. Huettel, A. Song, G. McCarthy. Functional Magnetic Resonance Imaging. – Sinauer Associates, 2004. - 492 p.</p> <p>2. R. Silverstein, F. Webster, D. Kiemle.</p>
1	Характеристики електромагнітного випромінювання, заселеність енергетичних рівнів, розподіл Больцмана, ефективність перетворення світлової енергії в акумульовану хімічну	1 лб	
2-3	Симетрія молекул	2 лк	
2	Визначення точкової групи симетрії молекул	1 лб	
3	Розклад звідних представлень	1 лб	
4	Мікрохвильовий метод дослідження оберտальних спектрів молекул	1 лк	

4	Розрахунок міжатомної віддалі за даними обертальної спектроскопії	1 лб	<p>Spectrometric Identification of Organic Compounds. - Wiley, 2005. - 512 p.</p> <p>3. H. Friebolin. Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy. - Wiley-VCH, 2005. - 430 p.</p> <p>4. B. Stuart. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. - Wiley, 2004. - 224 p.</p> <p>5. E. Hoffmann, V. Stroobant. Mass Spectrometry: Principles and Applications. 3rd Edition. - Wiley-Interscience, 2007. - 512 p.</p> <p style="text-align: center;">Інформаційні ресурси</p> <p>1. http://tft.kpi.ua/ua/2-uncategorised/169-fizychni-metody-doslidzhen.html</p> <p>2. https://eduportal.kau.org.ua/course/view.php?id=11</p> <p>3. https://chem.lnu.edu.ua/course/fizychni-metody-doslidzhennya</p> <p>4. https://chemistry.snu.edu.in/content/physical-methods-chemistry</p>
5-8	Коливальна спектроскопія	4 лк	
5-6	Аналіз за симетрією нормальних коливань молекули	2 лб	
7-8	Інтерпретація ІЧ спектрів	2 лб	
9-11	Методи електронної УФ-, видимої спектроскопії	3 лк	
9-11	Дозволеність електронних та вібронних переходів за симетрією та мультиплетністю	3 лб	
12-15	Методи магнітної резонансної спектроскопії	4 лк	
12-15	Передбачення та інтерпретація спектрів ПМР, спін-спінова взаємодія	4 лб	
16	Мас-спектроскопія	1 лк	
16	Інтерпретація мас-спектрів	1 лб	