

Розробник: Ніколаєнко Тимофій Юрійович, асистент кафедри молекулярної фізики,
доктор фізико-математичних наук.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри молекулярної фізики

_____ (підпис) (Булавін Л.А.)

Протокол від «10» червня 2021 р. № 16

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «22» червня 2021 року № 4

Голова науково-методичної комісії _____ (підпис) (Оліх О.Я.)

Розробник: Ніколаєнко Тимофій Юрійович, асистент кафедри молекулярної фізики,
доктор фізико-математичних наук.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри молекулярної фізики

_____ (підпис)

(Булавін Л.А.)

Протокол від «10» червня 2021 р. № 16

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «22» червня 2021 року № 4

Голова науково-методичної комісії _____

(підпис)

(Оліх О.Я.)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – є оволодіння сучасними спектроскопічними методами, теоретичними положеннями оптичної спектроскопії та основними застосуваннями цих методів при постановці та інтерпретації спектроскопічних експериментів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати основи загальної фізики, термодинаміки.
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, загальної фізики.

3. Анотація навчальної дисципліни: Вивчаються фізичні основи основних методів оптичної спектроскопії (обертальна, коливальна та електронна спектроскопія), а також – спектроскопії електронного парамагнітного (ЕПР) та ядерного магнітного резонансу (ЯМР). На основі загальної квантово-механічної теорії взаємодії електромагнітного випромінювання з речовиною системно розглядаються конкретні моделі енергетичної структури речовини (квантові ротатори, гармонійні та ангармонійні квантові осцилятори, орбітальне наближення, хромофори тощо), а також – принципи побудови та методики проведення спектроскопічного експерименту, які підкріплюються лабораторними роботами. Метою вивчення дисципліни є отримання систематичних знань в області теорії взаємодії світла з речовиною та вміння їх використати при проведенні експериментів. Навчальна задача курсу полягає в оволодінні фізичними основами методів оптичної спектроскопії. Результати навчання полягають в умінні логічно і послідовно формулювати основні поняття спектроскопії та вибирати методи експериментальних спектроскопічних досліджень та моделі для теоретичного аналізу можливих спектроскопічних властивостей фізичних систем. Методи викладання: лекції та лабораторні роботи. Методи оцінювання: захист лабораторних робіт, опитування в процесі лекції, контрольні роботи після основних розділів спецкурсу, залік. Підсумкова оцінка виставляється на основі проміжних оцінок (80%) та заліку (20%)

4. Завдання (навчальні цілі): ознайомити студентів з основними методами оптичної спектроскопії (обертальна, коливальна та електронна спектроскопія), спектроскопії електронного парамагнітного (ЕПР) та ядерного магнітного резонансу (ЯМР), принципами побудови та методики проведення спектроскопічного експерименту.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Фізика», спеціальність 104 «Фізика та астрономія»), ОНП «Фізика» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики і характеризується складністю та невизначеністю умов.

Загальних:

Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

Фахових:

- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.
- Здатність оцінювати порядок величин у різних дослідженнях, так само як точності та значимості результатів.
- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту.
- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації.

5. Результати навчання за дисципліною:

| Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність) | | Форми викладання і навчання | Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання | Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни |
|---|--|--|---|--|
| Код | Результат навчання | | | |
| 1 | Знати: основні поняття спектроскопії, такі як електронні, коливальні та обертальні енергетичні рівні, електронні переходи при поглинанні квантів світла, переходи з випромінюванням квантів світла. | <i>Лекції, самостійна робота, лабораторні роботи</i> | <i>Модульна контрольна робота, опитування під час лекції, захист лабораторних робіт, перевірка рефератів.</i> | 50 |
| 2 | Вміти: вибирати методи експериментальних спектроскопічних досліджень та моделі для теоретичного аналізу можливих спектроскопічних властивостей фізичних систем, а також для постановки та інтерпретації експерименту. | <i>Лекції, самостійна робота, лабораторні роботи</i> | <i>Модульна контрольна робота, опитування під час лекції, захист лабораторних робіт, перевірка рефератів.</i> | 50 |

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

| Програмні результати навчання (назва) | Результати навчання дисципліни | 1 | 2 |
|---|--------------------------------|---|---|
| Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та астрономії. | | + | |
| Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій. | | | + |
| Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань. | | | + |

7. Схема формування оцінки:

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 (5 балів – 10 балів).
2. Захист реферату (5 балів – 10 балів).
3. Модульна контрольна робота 2 (5 балів – 10 балів).
4. Захист лабораторних робіт (30 балів – 40 балів).
5. Опитування під час лекції (5 балів – 10 балів).

- підсумкове оцінювання: у формі заліку

Підсумкова оцінка з освітнього компонента в цілому, підсумковою формою контролю за яким встановлено залік, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання під час семестру (оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час заліку.

Формою проведення заліку є написання письмової роботи з подальшою усною співбесідою. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час заліку, становить 20 балів за 100 бальною шкалою.

Перекладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

| | Модуль 1 | Модуль 2 | Залік | Підсумкова оцінка |
|-----------------|----------|----------|-------|-------------------|
| Мінімум | 25 | 25 | 10 | 60 |
| Максимум | 40 | 40 | 20 | 100 |

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Обов'язковою умовою допуску до заліку є захист всіх лабораторних робіт та написання модульних контрольних робіт. Здобувач освіти не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше ніж 50 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні змістових модулів. Захист рефератів проводиться упродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

| | |
|-----------------------------|--------|
| Зараховано / Passed | 60-100 |
| Не зараховано / Fail | 0-59 |

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій.

| № п/п | Номер і назва теми | Кількість годин | | |
|---|---|-----------------|-----------|-----------|
| | | Лекц. | Лаб | Сам. роб. |
| <i>Змістовий модуль 1 Електронна будова та молекулярні орбіталі органічних сполук</i> | | | | |
| 1 | ТЕМА 1. Взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами Квантово-механічний підхід до поглинання світла речовиною. Механізми взаємодії: поглинання та розсіювання. Закон поглинання світла. Фізичні величини, що характеризують спектроскопічні властивості речовин. Електронні, коливальні, та обертальні стани молекул. Основні спектроскопічні методи дослідження (оглядово). | 2 | 0 | 3 |
| 2 | ТЕМА 2. Техніка проведення оптичних спектроскопічних досліджень. Основні принципи побудови спектральних приладів. Джерела електромагнітного випромінювання. Монохроматори. Приймачі (детектори) випромінювання. Фур'є-спектроскопія. Особливості приготування зразків при дослідженні біополімерів. | 4 | 2 | 3 |
| 3 | ТЕМА 3. Електронна спектроскопія Ймовірнісний характер взаємодії кванта світла з атомами та молекулами. Електронні переходи. Коефіцієнти Ейнштейна. Вимушені переходи. Сила осцилятора. Випромінювальні переходи в атомах. Терми. Правила відбору. Атомні спектри поглинання. Рентгенівська та фотоелектронна спектроскопія. | 2 | 3 | 3 |
| 4 | Тема 4 Хімічні зв'язки і будова молекул Хімічна будова молекул. Ковалентні зв'язки. Конфігурація ковалентних зв'язків (σ -, π - і δ -зв'язки). Орбіталі. Гібридизація атомних орбіталей. Нековалентні зв'язки. Водневий зв'язок. Хімічна будова і просторова організація біополімерів. Конформації. Електронні переходи в молекулах. Поглинання білків в УФ-області. Спектроскопія оптично-активних середовищ. | 2 | 0 | 3 |
| <i>Змістовий модуль 2 Фізичні моделі та оптичні властивості матеріалів</i> | | | | |
| 5 | Тема 5 Основи ІЧ, КР та ВКР- спектроскопії Коливальні стани молекул в рамках гармонійного наближення. Роль ангармонізму. Резонанси Фермі. Правила відбору для коливальних переходів. Спектральні прояви водневого зв'язування. Комбінаційне розсіювання світла як спектральний метод дослідження. Ідентифікація атомних груп молекул за їхніми ІЧ та КР спектрами. | 4 | 2 | 6 |
| 6 | Тема 6. Спектроскопія ЯМР та ЕПР Взаємодія магнітного диполя зі змінним магнітним полем. Спін. Спіни ядер. Природні ізотопи із ненульовим ядерним спіном. Поняття про методи багатовимірної спектроскопії. Застосування ЯМР у медицині. ЕПР як джерело інформації про структуру, хімічні та фізичні властивості молекул. | 4 | 3 | 3 |
| 7 | Тема 7. Мас-спектрометрія Основні методи іонізації зразків та аналізу розподілу частинок за масами і зарядами. Мас-спектрометрія матричної ізоляції. Мас-спектрометрія як інструмент дослідження зв'язування молекул. | 2 | 0 | 3 |
| | ВСЬОГО | 20 | 10 | 80 |

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекції – **20 год.**, *лаб.роб.* – **10 год.**, *консультації* – **1 год.** Самостійна робота – **80 год.**

9. Рекомендовані джерела:

1. В.Є. Погорелов Комбінаційне розсіяння світла, Київ, ВПЦ КНУ, 2004 р.
2. Ящук В.М Фотоніка полімерів: Навч. посібн. для студентів фізичного факультету.– К.: Видавничо-поліграфічний центр „Київський університет”, 2004.– 119 с.
3. Л.В.Поперенко, В.С.Стащук Основи фізики матеріалів оптотехніки. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2011. - 686с.
4. McHale J.L. Molecular Spectroscopy. 2nd Edition. – CRC Press, Taylor & Francis Group, 2017. – 477 р.