

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра органічної хімії



**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Заступник декана з навчальної роботи

*Наталія Усенко*  
Наталія УСЕНКО

*30* ” *06* 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
**“ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ В ХІМІЇ”**  
для здобувачів вищої освіти

галузь знань	<b>10 Природничі науки</b>
спеціальність	<b>102 Хімія</b>
освітній рівень	<b>бакалавр</b>
освітня програма	<b>Хімія</b>
вид дисципліни	<b>обов’язкова</b>

Форма навчання	<b>денна</b>
Навчальний рік	<b>2022/2023</b>
Семестр	<b>VI, VII</b>
Кількість кредитів ECTS	<b>9 (всього) 4 (VI семестр) 5 (VII семестр)</b>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>українська</b>
Форма проміжного контролю	<b>залік</b>
Форма заключного контролю	<b>іспит</b>

Викладачі: д.хім.н., проф., професор, **Воловенко Юліан Михайлович**,  
д.хім.н., проф., професор, **Лампека Ростислав Дмитрович**,  
к.хім.н., доц., доцент, **Горічко Мар’ян Віталійович**,  
к.хім.н., доцент, **Мілохов Демид Сергійович**

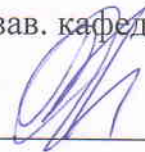
Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) “\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.  
на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) “\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Розробники:

**Воловенко Юліан Михайлович, д.х.н., проф., професор кафедри органічної хімії;**  
**Лампека Ростислав Дмитрович, д.х.н., проф., професор кафедри неорганічної хімії;**  
**Григоренко Олександр Олегович, д.х.н., доц., професор кафедри органічної хімії;**  
**Горічко Мар'ян Віталійович, к.х.н., доц., доцент кафедри органічної хімії;**  
**Мілохов Демид Сергійович, к.х.н., доцент кафедри органічної хімії;**  
**Шабликіна Ольга Валентинівна, к.х.н., доцент кафедри органічної хімії.**

ЗАТВЕРДЖЕНО

В. о. зав. кафедри органічної хімії, професор



Володимир ХИЛЯ

Протокол від 03 червня 2022 року № 14

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від 29 червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії



Олександр ПОЇК

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з теоретичними засадами та практичними прийомами застосування фізичних методів дослідження у вивченні хімічної структури та процесів.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

- Загальний курс неорганічної та органічної хімії на рівні бакалавра.
- Загальний курс фізики на рівні бакалавра.

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Вивчаються основи фізичних методів: ядерного магнітного резонансу, електронного парамагнітного резонансу, мас-спектрометрії, інфрачервоної спектроскопії, електронної спектроскопії; також вивчаються прийоми отримання на основі даних фізичних методів дослідження інформації про склад, будову та хімічну поведінку сполук.

**4. Завдання:** розвиток теоретичних уявлень здобувачів освіти про основні принципи мас-спектрометрії, спектрометрії ядерного магнітного резонансу, електронного парамагнітного резонансу, інфрачервоної спектроскопії, електронної спектроскопії; набуття здобувачами освіти практичних навичок у розв'язанні задач експериментальної хімії за допомогою фізичних методів дослідження.

Навчальна дисципліна спрямована на досягнення загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК2, ЗК3, ЗК10 та СК1, СК3, СК4, СК8.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

<b>Код</b>	<b>Результат навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)</b>	<b>Форми викладання і навчання</b>	<b>Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних занять та виконання самостійної роботи ПтК-1, написання контрольної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК</b>	<b>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</b>
<b>1.1</b>	Знати основні спектральні характеристики, що лежать в основі ідентифікації хімічних сполук.	Лекції, практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>5</b>
<b>1.2</b>	Знати класифікацію хімічних сполук та особливості їх будови, які обумовлюють їх спектральні характеристики.	Лекції, практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>25</b>

<b>1.3</b>	Знати основні діапазони випромінювання електромагнітних хвиль, принципи спектроскопічних досліджень, що лежать в основі будови приладів та експериментальних методик.	Лекції, практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>10</b>
<b>2.1</b>	Уміти знайти у першоджерелах інформацію про фізичні властивості хімічних речовин.	Практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>5</b>
<b>2.2</b>	Уміти здійснювати інтерпретацію спектральних даних та встановлювати будову речовини; вміти встановлювати зворотній зв'язок “спектральні властивості – будова” і прогнозувати вигляд спектрів заданих речовин.	Практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>25</b>
<b>2.3</b>	Уміти вирішувати питання про раціональне використання того чи іншого конкретного спектрального методу або комплексне застосування різних методів для розв'язування конкретних задач.	Лекції, практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>10</b>
<b>3.1</b>	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, що стосується фізичних методів дослідження в хімії.	Лекції, практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>5</b>
<b>3.2</b>	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями.	Практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>5</b>
<b>4.1</b>	Уміти самостійно подавати дані спектральних досліджень для звітів, доповідей і наукових публікацій.	Практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>5</b>
<b>4.2</b>	Усвідомлювати морально-етичну відповідальність за оприлюднені висновки, що були зроблені в ході інтерпретації спектральних даних.	Лекції, практичні заняття, самостійна робота.	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	<b>5</b>

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) з програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН \ РНД (код)	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
P02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.	+			+						
P04. Розуміти основні закономірності та типи хімічних реакцій, їхні характеристики.	+	+	+							
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	+	+	+	+						
P07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атомів, молекул та хімічних зв'язків.	+			+	+	+				
P08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.			+	+	+	+			+	+
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне і спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.				+			+	+	+	
P20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+					+	+	+		
P21. Здійснювати моніторинг і аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.				+			+	+		

**7. Схема формування оцінки.**

**7.1. Форми оцінювання здобувачів освіти:**

**Семестрове оцінювання:**

**VI семестр**

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані здобувачем освіти: **100 балів / 60 балів**, а саме:

1. Активність під час занять – виконання практичних робіт, виконання самостійної роботи: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **80/48 балів**.
2. Контрольна робота № 1: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **10/6 балів**.
3. Контрольна робота № 2: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **10/6 балів**.

**Підсумкове оцінювання (у формі заліку).**

## VII семестр

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані здобувачем освіти: **60 балів / 36 балів**, а саме:

1. Активність під час занять – виконання практичних робіт, виконання самостійної роботи: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **45/27 балів**.
2. Контрольна робота № 1: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **10/6 балів**.
3. Контрольна робота № 2: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2 (частково) – **5/3 бали**.

### **Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):**

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані здобувачем освіти: **40 балів / 24 бали**.

Результати навчання, які будуть оцінюватись: РН 1.1–1.3, 2.1–2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 5 письмових завдань (4 теоретичні питання та 1 практичне завдання).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою, ніж **24 бали**.

**Здобувач освіти допускається до іспиту, якщо впродовж семестру він:**

- набрав не менше, ніж **36 балів**;
- виконав і вчасно здав усі практичні роботи;
- виконав завдання самостійної роботи;
- написав контрольні роботи.

## **7.2. Організація оцінювання:**

### VI, VII семестри

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота № 1: після проходження тем 1–10;

Контрольна робота № 2: після проходження тем 11–15;

Практичні роботи: оцінювання не пізніше семи днів після виконання;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Здобувачі освіти мають право на одне перескладання контрольної роботи у визначений викладачем термін.

## **7.3. Шкала відповідності оцінок:**

Для заліку

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
<b>Зараховано / Passed</b>	60-100
<b>Не зараховано / Fail</b>	0-59

## Для іспиту

<b>Оцінка (за національною шкалою) / National grade</b>	<b>Рівень досягнень / Marks</b>
<b>Відмінно / Excellent</b>	90-100
<b>Добре / Good</b>	75-89
<b>Задовільно / Satisfactory</b>	60-74
<b>Незадовільно / Fail</b>	0-59

## 8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій, практичних занять, самостійної роботи.

### VI СЕМЕСТР

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
Розділ 1. Спектроскопія ядерно-магнітного резонансу (ЯМР спектроскопія).				
1.1	Вступ. Фізичні явища, що лежать в основі ЯМР. Основні принципи методу. Блок-схема ЯМР спектрометра. Поняття про Фур'є ЯМР спектроскопію. Технічні аспекти зйомки спектрів ЯМР.	2	2	4
1.2	Хімічний зсув сигналів ЯМР: зв'язок з будовою хімічних сполук.	2	2	4
1.3	Спін-спінова взаємодія: її прояв у спектрах ЯМР та використання.	2	2	4
1.4	Основні параметри спектрів $^1\text{H}$ ЯМР – аналіз прикладів.	2	2	4
1.5	Спектроскопія ЯМР на ядрах $^{13}\text{C}$ . Порівняння з $^1\text{H}$ ЯМР спектроскопією.	2	2	4
1.6	Спеціальні методики в ЯМР. Декаплінг. Ядерний ефект Оверхаузера.	2	2	4
1.7	Мультиядерний ЯМР.	2	2	4
1.8	Динамічні ефекти в ЯМР.	1	2	4
1.9	Двовимірні методики в ЯМР. Типи двовимірних спектрів.	1	2	5
1.10	Використання двовимірних методик ЯМР у структурних дослідженнях.	1	2	5
Контрольна робота № 1		1		
<b>Усього за розділом 1</b>		<b>18</b>	<b>20</b>	<b>42</b>
Розділ 2. Спектроскопія електронного парамагнітного резонансу (спектроскопія ЕПР).				
2.1	Основні принципи ЕПР.	2	2	4
2.2	g-Фактор. Анізотропія g-фактор.	2	2	4
2.3	Надтонка структура спектрів ЕПР.	2	2	4
2.4	Спектри ЕПР органічних радикалів. Поняття про спіновий гамільтоніан (СГ).	2	2	4
2.5	Спектри ЕПР координаційних сполук у заморожених розчинах	1	2	4
Контрольна робота № 2		1		
<b>Усього за розділом 2</b>		<b>10</b>	<b>10</b>	<b>20</b>
<b>УСЬОГО за VI семестр</b>		<b>28</b>	<b>30</b>	<b>62</b>

Загальний обсяг – **120** годин, у тому числі:

Лекцій – **28** годин;

Практичних занять – **30** годин;

Самостійна робота – **62** години.



## VII СЕМЕСТР

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
<b>Розділ 3. Інфрачервона (ІЧ) спектроскопія.</b>				
3.1	Коливальна спектроскопія – метод дослідження хімічних сполук. Спектрофотометри. Методика одержання спектрів твердих, рідких і газуватих речовин.	2		2
3.2	Електромагнітний спектр. Поняття теорії коливальних спектрів. Умови для виникнення ІЧ спектра молекули. Спектри комбінаційного розсіювання (СКР). Силова стала: її фізичне тлумачення.	2		2
3.3	Коливання двохатомних молекул. Коливання багатоатомних молекул.	2		2
3.4	Використання концепції групових (характеристичних) коливань для аналізу ІЧ спектрів.	2	2	4
3.5	Поглинання алканів, алкенів, алкінів, алкадієнів, ароматичних сполук.	2	2	4
3.6	Поглинання оксигенвмісних сполук: спиртів та фенолів.	2	2	4
3.7	Поглинання альдегідів, кетонів, карбонових кислот.	2	2	4
3.8	Поглинання нітрогеновмісних сполук: аліфатичних та ароматичних амінів, нітрילів, нітросполук.	2	2	4
3.9	Поглинання амідів карбонових кислот, амінокислот та пептидів.	2	2	4
3.10	ІЧ спектри неорганічних сполук.	1	2	4
Контрольна робота № 1		1		
<b>Усього за розділом 3</b>		<b>20</b>	<b>14</b>	<b>34</b>
<b>Розділ 4. Ультрафіолетова (УФ) спектроскопія.</b>				
4.1	Основні поняття та принципи електронної спектроскопії. Фізична природа забарвлення речовини	2		2
4.2	Практичні аспекти використання електронної спектроскопії. Спектри поглинання та випромінювання. Діаграма Яблонського. Практичні аспекти вимірювання спектрів поглинання	2	2	4
4.3	Електронні спектри основних класів органічних сполук	2	2	4
4.4	Сольватохромія. Хромофори та ауксохроми. Залежність між кольором та будовою сполуки. Батохромний та гіпсохромний зсув	2	2	4
4.5	Ціанінові барвники. Видатні наукові школи з теорії інтерпретації їх будови та спектрів поглинання	1	2	4
Контрольна робота № 2		1		
<b>Усього за розділом 4</b>		<b>10</b>	<b>8</b>	<b>18</b>

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
<b>Розділ 5. Мас-спектроскопія. Комбіноване використання фізичних методів для дослідження складу та будови хімічних сполук.</b>				
5.1	Поняття про фізичні методи в хімії, основні терміни, класифікація методів, їх загальний огляд. Основні принципи мас-спектрометрії		4	4
5.2	Застосування мас-спектрометрії для визначення складу і будови хімічних сполук		6	8
5.3	Стратегія використання різних фізичних методів дослідження для вирішення складних структурних проблем: теоретичні та практичні аспекти	1 консультація	12	11
<b>Усього за розділом 5</b>			<b>22</b>	<b>23</b>
<b>УСЬОГО за VII семестр</b>		<b>30</b>	<b>44</b>	<b>75</b>

Загальний обсяг **150** годин, у тому числі:

Лекцій – **30** годин;

Практичних занять – **44** години;

Консультація – **1** година;

Самостійна робота – **75** годин.

## 9. 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. The Compilation of a Table of Mass and Abundance Values, in Mass spectrometry and its applications to organic chemistry', 1st ed.; Elsevier: Amsterdam, 1960.
3. Brand, J. C. D.; Eglinton, G. Applications of Spectroscopy to Organic Chemistry, Oldbourne Press London, 1965. – 234 p.
4. Excited States in Organic Chemistry. Front Cover. John A. Barltrop, John D. Coyle. WILEY, 1975. – 376 p.
5. Fundamentals of Molecular Spectroscopy / C.N. Banwell. – McGraw-Hill Book Company (UK) Limited, 1972, 1983.
6. Fundamentals, Techniques, and Analytical Problem-Solving / A.Lee Smith. – A Wiley-Interscience Publication John Wiley and Sons, Inc., 1979.
7. Gross J.H. Mass Spectrometry: A Textbook, 3rd Ed. – Springer, 2017. – 986 p.
8. Hecht M. G. Magnetic Resonance Spectroscopy. New York, Willey, 1967.
9. Infrared Absorption Spectroscopy: Practical / Koji Nakanishi. – Holden-Day, Inc., San Francisco and Nankodo Company Limited, Tokyo. – 1962.
10. James R. Bolton, John E. Wertz. Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications. McGraw-Hill, 1972. – 592 p.
11. Linden-Bell R. M., Harris R.K. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. London, Nelson, 1969.
12. Magnetic Resonance / K.A. Mclauchlan. – Clarendon Press Oxford, 1972.
13. Physical Methods for Chemists / Russell S. Drago. – Saunders College Publishing, 1992. – 750 p.
14. Physical methods for chemists / Russell S. Drago. - 2nd ed. Rev. ed. of: Physical methods in chemistry. 1977. – 766 p.
15. Silverstein R.M., Webster Fr.X., Kiemle D.J., Bryce D.L. Spectrometric Identification of Organic Compounds, 7th Ed. – Wiley, 2005. – 550 p.
16. Stern E. S.; Timmons C. J. Electronic Absorption Spectroscopy in Organic Chemistry. – Edward Arnold (Publishers) Ltd London, 1970.
17. URL: [https://orgchem.knu.ua/upload/metod\\_infrared\\_spectroscopy\\_problems.pdf](https://orgchem.knu.ua/upload/metod_infrared_spectroscopy_problems.pdf)
18. Кипріанов А.І. Вступ до електронної теорії органічних сполук. – Київ: Наукова думка, 1975. – 190 с.
19. 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.
20. Мілохов Д.С., Шабликіна О.В. Інфрачервона спектроскопія: збірник задач для практичних занять. Ел. видання, 2021.

21. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу : підручник / Ю.М. Воловенко, І.В. Комаров, О.В. Туров, В.П. Хиля. – К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2016. – 703 с.
22. Ядерний магнітний резонанс в хімії: навч. посібник / М.Ю. Корнілов, Г.П. Кутров. – Київ: Вища школа, 1985. – 199 с.

### **Інтернет ресурси**

<https://organicchemistrydata.org/>

[http://www.aist.go.jp/aist\\_e/list/database/riodb/](http://www.aist.go.jp/aist_e/list/database/riodb/)

<https://webbook.nist.gov/chemistry/>