

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра молекулярної і медичної біофізики

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Декан факультету радіофізики,
біомедичної електроніки та
комп'ютерних систем



Сергій ШУЛЬГА

«24» жовтня 2024 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Молекулярна спектроскопія

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти _____ другий / магістерський _____

галузь знань _____ 10-Природничні науки _____
(шифр і назва)

спеціальність _____ 105 Прикладна фізика та наноматеріали _____
(шифр і назва)

освітня програма _____ Біофізика _____
(шифр і назва)

спеціалізація _____ _____
(шифр і назва)

вид дисципліни _____ обов'язкова _____

факультет _____ радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем _____

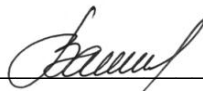
2024/2025 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченої радою факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем
24 червня 2024 року, протокол № 6

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Гламазда Олександр Юрійович, д.ф.-м.н., старший дослідник, професор кафедри молекулярної і медичної біофізики

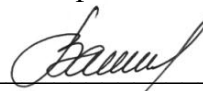
Програму схвалено на засіданні кафедри
молекулярної і медичної біофізики факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна
Протокол від 24 червня 2024 року № 6

Завідувач кафедри молекулярної і медичної біофізики


(підпис) Володимир БЕРЕЗ
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми Біофізика

Гарант освітньо-професійної програми: Біофізика


(підпис) Володимир БЕРЕЗ
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено науково-методичною комісією

факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від 24 червня 2024 року № 6

Голова науково-методичної комісії факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем


(підпис) Олександр БУТРИМ
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Молекулярна спектроскопія” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки

магістрів

(назва рівня вищої освіти)

спеціальності (напрямку) 105 Прикладна фізика та наноматеріали

спеціалізації _____

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни - детальне ознайомлення з основними поняттями, законами, принципами та методами сучасної молекулярної спектроскопії.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни є сформувати у здобувача вищої освіти наступні загальні та фахові компетентності.

Загальні:

1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності. (ЗК-1)
2. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово. (ЗК-2)
3. Здатність спілкуватися іноземною мовою. (ЗК-3)
4. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій. (ЗК-4)
5. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями. (ЗК-5)
6. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел. (ЗК-6)
7. Здатність працювати в команді. (ЗК-7)
8. Навички міжособистісної взаємодії. (ЗК-8)
9. Здатність працювати автономно. (ЗК-9)
10. Навики здійснення безпечної діяльності. (ЗК-10)
11. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК-11)

Фахові компетентності:

1. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів. (ФК-1)
2. Здатність оптимально визначати матеріальні засоби, необхідні для проведення наукового дослідження або науково-технічної розробки (матеріали, апаратура, обладнання, обчислювальна техніка та інше). (ФК-2)
3. Здатність аналізувати отримані результати, презентувати їх фахівцям у даній галузі, оформлювати наукові статті та науково-технічні звіти. (ФК-3)
4. Здатність відповідно до поставленої задачі виконувати науково-технічні розробки в галузі прикладної фізики та наноматеріалів. (ФК-4)
5. Здатність самостійно опановувати нову апаратуру та технології, в тому числі із суміжних галузей, для розв'язання виробничих задач. (ФК-5)

Основні завдання вивчення дисципліни також включають: надати необхідний обсяг знань в області описування експериментальних спектральних даних біологічних і медичних

досліджень, засвоєння фундаментальних теоретичних основ спектроскопії молекул і набуття навичок застосування отриманих знань для наукових досліджень, планування досліджень.

1.3. Кількість кредитів - 3

1.4. Загальна кількість годин - 90

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	-й
Семестр	
3-й	-й
Лекції	
24 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
12 год.	год.
Лабораторні заняття	
год.	год.
Самостійна робота	
54 год.	год.
Індивідуальні завдання	
1.	

1.6. Заплановані результати навчання студенти мають:

знати :

основні ідеї, поняття, принципи, закони і методи молекулярної спектроскопії;

вміти :

застосувати отримані знання для аналізу фізичних явищ і процесів, сформулювати основні висновки за наявних результатів спектроскопічних вимірювань.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Параметри, що характеризують енергетичні спектри. Елементи практичної спектроскопії.

Тема 1. Енергетичні рівні: основний і збуджені. Розщеплення енергетичних рівнів. Спонтанні і вимушені переходи між ними.

Заселення енергетичних рівнів. Симетрія молекул. Розщеплення енергетичних рівнів. Практичне використання вимушених переходів. Лазери.

Тема 2. Дисперсія електромагнітних хвиль.

Показник заломлення. Фазова швидкість. Використання дисперсії електромагнітних хвиль в спектральних дослідженнях.

Тема 3. Потужності випромінювання і поглинання.

Основні характеристики випромінювання і поглинання. Коефіцієнти Ейнштейна.

Тема 4. Рівноважне випромінювання. Нерівноважне випромінювання. Люмінесценція.
Теплове випромінювання. Основні характеристики теплового випромінювання. Схема Яблонського. Типи люмінесценції. Закон Стокса. Стоксів зсув. Правило Каші. Закон Вавілова. Вплив розчинника та температури на спектри флуоресценції. Процеси без випромінювання. Перенесення заряду.

Тема 5. Коефіцієнт поглинання. Коефіцієнт екстинкції. Сила осцилятора.
Закон Бугера–Ламберта–Бера. Використання абсорбційної спектроскопії для визначення концентрації речовини в розчині. Практичне використання.

Тема 6. Принципи побудови оптичних спектрометрів. Джерела випромінювання. Диспергуючі системи. Приймачі випромінювання.

Схеми монохроматорів. Джерела випромінювання. Дифракційна ґратка та призма як диспергуючі елементи оптичних спектрометрів. Приймачі випромінювання: болометри, фотодіоди, фотоелектронні помножувачі та ПЗЗ матриці.

Тема 7. Фур'є – спектрометри.

Особливості використання Фур'є – спектроскопії. Схема спектрометру. Методика обробки спектрограм.

Тема 8. Контур спектральної лінії. Основні методи розділення спектральних смуг, що перекриваються.

Фізичне обґрунтування ширини спектральної лінії. Розширення спектральної лінії. Критерій Релея.

Тема 9. Основні способи підвищення відношення сигнал/шум. Вибір оптимальних умов реєстрації оптичних спектрів.

Підвищення чутливості оптичних детекторів. Зниження шумового сигналу. Оптимізація умов реєстрації спектрів.

Тема 10. Принципи кількісного аналізу сумішей за спектральними даними.

Якісний аналіз сумішей речовин. Принципи кількісного аналізу: аналіз інтенсивності смуг речовин в спектрах люмінесценції, визначення концентрації речовин в суміші та кількість компонентів з аналізу спектрів поглинання.

Розділ 2. Електронні і коливальні спектри молекул. Спектри комбінаційного розсіювання світла

Тема 11. Правила відбору і теорія симетрії.

Правила відбору та їх порушення. Елементи теорії груп.

Тема 12. Параметри, що визначають інтенсивність електронного переходу.

Сила осцилятора. Правила відбору.

Тема 13. Природа забарвлення комплексних з'єднань.

Зв'язок між будовою хімічних сполук та їх забарвленням. Хромофори. Використання хромофорів в якості люмінесцентних міток.

Тема 14. Коливальні спектри. Силова стала. Принцип Франка-Кондона. Нормальні коливання. Резонанс Фермі.

Коливальні переходи. Правила відбору. Порушення правил відбору. Фізичне значення принципу Франка-Кондона. Приклади потенціальних кривих Франка-Кондона.

Випромінювальні та безвипромінювальні переходи. Нормальні коливання. Фізичне значення резонансу Фермі.

Тема 15. Комбінаційне розсіювання світла.

Різниця між коливальними методами дослідження речовин: абсорбційна спектроскопія і комбінаційне розсіювання (раманівська спектроскопія). Правила відбору.

Тема 16. Ідентифікація активних коливань для молекулярних структур з симетрією, що різниться.

Використання поляризаційного обладнання та допоміжного програмного забезпечення для ідентифікації коливальних мод.

Тема 17. Динамічне розсіювання світла.

Методика та технологія вимірювання. Оцінка параметрів комплексів в розчині. Дзета-потенціал.

Розділ 3. Спектроскопія магнітного резонансу. Мессбауерівська спектроскопія. Мас-спектрометрія.

Тема 18. Ядерний магнітний резонанс.

Методика ядерного магнітного резонансу. Особливості використання для ідентифікації та кількісного аналізу речовин. Хімічний зсув.

Тема 19. Електронний магнітний резонанс.

Опис методики. Особливості використання. Виявлення вільних радикалів. Парамагнітні мітки.

Тема 20. Мессбауерівська спектроскопія (ядерний гамма-резонанс).

Будова та принципи дії мессбауерівського спектрометра. Опис методу. Особливості використання.

Тема 21. Мас-спектрометрія. Основні типи мас-спектрометрів.

Теоретичні основи методу. Основні етапи проведення експерименту: Методи іонізації.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		Л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Параметри, що характеризують енергетичні спектри. Елементи практичної спектроскопії.												
<i>Тема 1. Енергетичні рівні.</i>						2						
<i>Тема 2. Дисперсія електромагнітних хвиль.</i>						2						
<i>Тема 3. Потужності випромінювання і поглинання.</i>						4						

<i>розсіювання світла.</i>												
<i>Тема 16. Ідентифікація активних коливань для молекулярних структур з симетрією, що різниться.</i>					2							
<i>Тема 17. Динамічне розсіювання світла.</i>		2			2							
Разом за розділом 2		6			16							
Розділ 3. Спектроскопія магнітного резонансу. Мессбауерівська спектроскопія. Мас-спектрометрія.												
<i>Тема 18. Ядерний магнітний резонанс.</i>		4			4							
<i>Тема 19. Електронний магнітний резонанс.</i>		2			4							
<i>Тема 20. Мессбауерівська спектроскопія (ядерний гамма- резонанс).</i>		2										
<i>Тема 21. Мас- спектрометрія. Основні типи мас- спектрометрів.</i>		2			4							
Разом за розділом 2		10			12							
Усього годин		24			54							

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	<i>Тема 1. Дослідження гідратації біополімерів методами коливальної спектроскопії</i>	2
2	<i>Тема 2. Визначення розміру наночасток методами динамічного розсіювання світла</i>	2
3	<i>Тема 3. Методи хеометрії для розподілення спектру на складові</i>	2
4	<i>Тема 4. Підсилення сигналу при взаємодії поглинаючої речовини з поверхнею. SERS та SEIRA</i>	2
5	<i>Тема 5. Двовимірна ЯМР спектроскопія</i>	2
6	<i>Тема 6. Вибір оптимальної частоти збудження для Раман-спектроскопії</i>	2
	Разом	12

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1.	<i>Тема 1. Енергетичні рівні.</i>	2
2.	<i>Тема 2. Дисперсія електромагнітних хвиль.</i>	2
3.	<i>Тема 3. Потужності випромінювання і поглинання.</i>	4

4.	Тема 4. Рівноважне випромінювання. Нерівноважне випромінювання. Люмінесценція.	4
5.	Тема 5. Коефіцієнт поглинання. Коефіцієнт екстинкції. Сила осцилятора.	4
6.	Тема 6. Контур спектральної лінії. Основні методи розділення спектральних смуг, що перекриваються.	4
7.	Тема 7. Основні способи підвищення відношення сигнал/шум. Вибір оптимальної швидкості сканування спектра.	2
8.	Тема 8. Принципи кількісного аналізу сумішей за спектральними даними.	4
9.	Тема 9. Правила відбору і теорія симетрії.	4
10.	Тема 10. Параметри, що визначають інтенсивність електронного переходу.	2
11.	Тема 11. Природа забарвлення комплексних з'єднань.	2
12.	Тема 12. Коливальні спектри.	4
13.	Тема 13. Ідентифікація активних коливань для молекулярних структур з симетрією, що різниться.	2
14.	Тема 14. Динамічне розсіювання світла.	2
15.	Тема 15. Ядерний магнітний резонанс.	4
16.	Тема 16. Електронний магнітний резонанс.	4
17.	Тема 17. Мас-спектрометрія. Основні типи мас-спектрометрів.	4
	Разом	54

6. Індивідуальні завдання

Підготувати реферат за статтею зі списку.

7. Методи контролю

2 контрольні роботи

8. Схема нарахування балів

Умовою допуску до екзамену є виконання контрольних робіт, оцінених на позитивну оцінку, а також отримання протягом семестру не менш ніж 30 балів (з 60 балів).

Бали нараховуються за роботу на лекційних та практичних заняттях (1 бал за кожні 2 заняття, загалом 24 бали).

Контрольна робота 1 містить два завдання, кожне оцінюється у 5 балів у разі правильних та повних рішень задач. Контрольна робота 2 містить два завдання, кожне з яких оцінюється максимально у 5 балів. Частковий розв'язок задач знижують оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повного розв'язку містить робота студента.

Індивідуальне завдання захищаються студентами та оцінюється у 10 балів (10 балів – вичерпне та повний (відмінний) розв'язок та правильні і повні відповіді на додаткові питання; Частковий розв'язок задачі та неправильні або не повні відповіді на питання знижують оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повного 8 розв'язку містить робота студента та наскільки вичерпними були відповіді на питання; 0 балів – розв'язок і відповіді неправильні або відсутні).

Екзаменаційний білет складається з трьох питань, за вичерпні відповіді на перші два з них нараховується по 13 балів, за вичерпну відповідь на третє питання – 14 балів (що дає максимальні 40 балів за іспит. Часткова відповідь на кожне питання та частковий розв'язок задачі знижує максимальну оцінку до меншої кількості балів пропорційно тому, яку частину від повної відповіді на це питання або розв'язку містить письмова робота студента.

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання						Екзамен (залікова робота)	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Розділ 3	Контрольна робота, передбачена навчальним планом		Індивідуальне завдання	Разом	
T1-T10	T11-T17	T18-T21	1	2			
7.5+7.5	4.5+4.5	3+3	10	10	10	60	40
					100		

T1, T2 ... – теми розділів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована література

Основна література

1. Мельничук Д. О., Мельничук С. Д., Войціцький В. М., Грищенко В. А., Калачнюк Л. Г., Хижняк С. В., Цвіліховський В. І. Аналітичні методи досліджень. Спектроскопічні методи аналізу: теоретичні основи і методики: навчальний посібник для підготовки студентів вищих навчальних закладів. К.: ЦП «Компринт», 2016. – 289 с.

2. Електронна спектроскопія в хімічних дослідженнях та в хімічному матеріалознавстві. Лабораторний практикум : навчальний посібник / А. П. Шкумат. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2015. – 168 с.

3. Зима В.Л. та ін. Біофізика. Практикум: Навчальний посібник / Зима В.Л., Мірошніченко М.С., Давидовська Т.Л., Ганчурін В.П., Прилуцький Ю.І. - К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2003.

4. Fundamentals of Modern UV-visible Spectroscopy: Primer. Author, Tony Owen. Publisher, Agilent Technologies, 2000. Length, 136 pages.

5. Dynamic Light Scattering: An Introduction in 30 Minutes.
https://warwick.ac.uk/fac/cross_fac/sciencecity/programmes/internal/themes/am2/booking/particlesize/intro_to_dls.pdf