

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ**

ЗАТВЕРДЖЕНО

Вченою радою

Інституту органічної хімії НАН України

протокол № 18

від « 07 » 12 20 20 року

Голова Вченої ради
органічної хімії

НАН України

 акад. В.І. Кальченко



2020 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА З ДИСЦИПЛІНИ

**«ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ
ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК»**

**для аспірантів третього науково-освітнього рівня
спеціальності 102-«Хімія», спеціалізація «Органічна хімія»,
галузь знань 10 – природничі науки**

Число кредитів ЄКТС – 3 (90 год.)

Лекцій – 20 годин

Практичних занять – 8 годин

Самостійна робота – 54 годин

Консультації – 8 годин

Форма контролю знань – залік

Робоча програма з дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук» для здобувачів третього науково-освітнього рівня ступеня доктора філософії за спеціальністю 102 – хімія, галузь знань 10 – природничі науки.

Розробники:

Змістовний модуль 1. Електронна спектроскопія органічних молекул

О.О. Іщенко, д.х.н., чл.-кор.



(підпис)

Змістовний модуль 2. Спектральна ідентифікація органічних сполук

О.Б. Роженко, д.х.н., ст.н.с.



(підпис)

Програму затверджено на засіданні Вченої ради

Інституту органічної хімії НАН України

протокол № 18

від « 07 » 12 2020 року

Вчений секретар

к.х.н.



В.С. Нікітченко

© О.О. Іщенко, 2020 р.

© О.Б. Роженко, 2020 р.

ПЕРЕДМОВА

Історія виникнення пов'язана з відкриттям у 1873 р. німецьким хіміком Германом Фогелем явища спектральної сенсибілізації органічними барвниками фотографічного процесу, що привело до необхідності характеризувати область і селективність поглинання молекул фотосенсибілізаторів для їх цілеспрямованого пошуку.

Навчальна дисципліна «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук» є однією з базових у підготовці фахівців в галузі хімії, оскільки дає можливість опанувати знання щодо електронної і просторової будови, речовин, їх люмінесцентної здатності, сольватохромії і асоціації у різних агрегатних станах і середовищах, шляхах перетворення світлової енергії в органічних молекулах, що є керівництвом для їх цілеспрямованого пошуку для сфер практичного застосування.

Невід'ємною складовою роботи сучасного хіміка в науковій чи заводській лабораторії, на виробництві є на сьогодні контроль перебігу хімічної реакції та вивчення її кінетики, спектральний аналіз структури продукту реакції та його чистоти. Кожне окремо завдання можна вирішити, використовуючи аналітичні методи (елементний аналіз, газову та рідинну хроматографію), мас-спектрометрію, рентгеноструктурний аналіз. Кожен із цих підходів є корисним, однак має свої обмеження. В той же час, спектральні методи є найефективнішими і універсальними. Тому базові знання основних спектральних методів є необхідними для самостійної роботи в сучасній хімічній лабораторії, вони також є невід'ємною частиною сучасного органічного синтезу, фармакології та хімічної технології органічних речовин.

Програма навчальної дисципліни складається з двох змістовних модулів:

1. Електронна спектроскопія органічних молекул
2. Спектральна ідентифікація органічних сполук

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 90 годин / 3 кредити ЕКТС.

Міждисциплінарні зв'язки. Навчальна дисципліна “ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК” є однією з обов'язкових, яка входить до дисциплін професійної підготовки. Даний курс вивчається аспірантами протягом IV-V семестрів другого та третього навчальних років.

1. Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Метою дисципліни є ознайомлення аспірантів з основними процесами поглинання, перетворення і випромінювання світлової енергії в органічних молекулах, виявлення зв'язку цих процесів з електронною будовою молекул, опанування ними стратегії і тактики цілеспрямованого пошуку нових сполук з наперед заданими властивостями для світлочутливих матеріалів новітніх технологій оптоелектроніки, лазерної техніки, голографії, фотовольтаїки, біології та медицини.

1.2. Предметом і задачею електронної спектроскопії є спектри поглинання і люмінесценції різних класів органічних молекул, чинники, що її зумовлюють, випромінювальні і безвипромінювальні процеси, квантово-хімічні розрахунки, дослідження електронної та стеричної структури молекул в основному та збудженому станах.

1.3. Завданням дисципліни є формування теоретичних основ спектральних методів та навичок практичного їх використання.

1.4. Очікувані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми аспіранти повинні:

Знати та розуміти:

- можливості застосування електронної спектроскопії в органічній хімії як для вирішення науково - дослідних, так і прикладних задач;
- закономірності, що зв'язують будови речовини з її електронними спектрами поглинання і випромінювання;
- методи розв'язання дослідницьких і практичних задач за допомогою електронної спектроскопії;
- шляхи перетворення світлової енергії органічними молекулами;

- прогножуючу здатність електронної спектроскопії при цілеспрямованому синтезі речовин з заданими спектрально-люмінесцентними властивостями;
- теоретичні основи спектральних методів, що належать до даного курсу;
- призначення, особливостей та аспектів практичного застосування спектральних методів;
- загальну будову спектрометрів та окремих їх вузлів.

Вміти:

- обробляти спектри поглинання і люмінесценції;
- проводити квантово-хімічні розрахунки молекул сучасними методами і аналізувати їх результати;
- встановлювати зв'язок між теоретичними розрахунками електронної будови і експериментальними лінійними і нелінійними спектрами поглинання і випромінювання молекул;
- прогнозувати потенційно фотоактивні молекули.
- застосовувати оптичну та радіоспектроскопію для контроль перебігу хімічної реакції, вивчення її кінетики, спектрального аналізу структури продукту реакції та встановлення його чистоти;
- правильно підготувати зразок для спектральних досліджень;
- правильно обрати необхідну методика;
- самостійно виконувати первинну обробку та інтерпретацію спектрів;
- прогнозувати вигляд спектрів та спектральних параметрів органічних речовин;
- визначати структуру хімічної сполуки, використовуючи один або кілька різних спектральних методів;
- самостійно поглиблювати свої знання та практичні навички в галузі спектроскопії.

Володіти:

- методами сучасної квантової хімії;
- фотофізичними і фотохімічними процесами в органічних молекулах;

- ідеологією цілеспрямованого синтезу нових сполук для задач, пов'язаних з перетворенням світлової енергії;

- основними принципами роботи активних і пасивних лазерних середовищ, голографії, електролюмінесценції, нелінійної оптики, фотовольтаїки та фотодинамічної терапії, тобто сферами найбільш розповсюдженого застосування фотоактивних молекул;

- правильно застосовувати спектральні методи;

- практично застосовувати окремі спектральні методи;

- у виборі комплексної стратегії застосовувати кілька методів для вирішення аналітичної чи структурної задачі.

Сформовані компетентності:

- Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики. Розв'язувати складні наукові задачі та проблеми, включно з прийняттям рішень щодо відбору даних та вибору методів досліджень для вивчення природничих наук у різних;

- Здатність самостійно формулювати і вирішувати оригінальні дослідницькі завдання в області органічної хімії.

- Навички компетентного використання математичних і числових методів, які використовуються у органічній хімії.

Програмні результати навчання:

- Знання і вміння використовувати сучасні інформаційні та комунікаційні технології, комп'ютерні засоби та програми при проведенні наукових досліджень.

- Оволодіння сучасними методами фізико-хімічного дослідження органічних сполук.

- Знання теорії будови та кольоровості органічних сполук

2. Опис навчальної дисципліни

Галузь знань, напрям підготовки, спеціальність, освітньо-кваліфікаційний рівень	
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Рівень вищої освіти	Третій (освітньо - науковий)
Характеристика навчальної дисципліни	
Вид	Цикл професійної підготовки
Загальна кількість годин	90
Кількість кредитів ECTS	3
Кількість змістових модулів	2
Курсовий проект (робота) (якщо є в робочому навчальному плані)	-
Форма контролю	залік
Показники навчальної дисципліни для денної та заочної форм навчання	
Рік підготовки	2-3
Семестр	4-5
Лекційні заняття	20 год.
Практичні, семінарські заняття	8 год.
Самостійна робота	54 год.
Консультації	8 год
Індивідуальні завдання	-

3. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 1. Електронна спектроскопія органічних молекул

Тема 1. Електронна спектроскопія: визначення, коло проблем і можливості.

Визначення поняття електронної спектроскопії і кола проблем, які вона вивчає. Її місце серед інших видів спектроскопії. Хвильові та енергетичні характеристики. Фізика і хімія зору. Фізична теорія кольоровості. Закон Бугера – Ламберта – Бера. Експериментальне реєстрування електронних спектрів поглинання і люмінесценції.

Тема 2. Ключові принципи електронної спектроскопії.

Принцип Франка – Кондона та наслідки з нього для спектрів поглинання та люмінесценції. Правило Каша, закони Вавілова, Льовшина та Стокса.

Тема 3. Випромінювальні і безвипромінювальні шляхи дезактивації електронно-збуджених станів органічних молекул.

Діаграма Яблонського. Синглетний і триплетний стани. Коливальна релаксація, внутрішня і інтеркомбінаційна конверсія, флуоресценція і фосфоресценція.

Тема 4. Сольватохромія і асоціація органічних молекул.

Вплив природи середовища на електронні спектри органічних молекул. Позитивна і негативна сольватохромія. Асоціація молекул. Н- та J- агрегати.

Тема 5. Електронні спектри основних класів органічних молекул.

Типи електронних переходів. Спектри поглинання і флуоресценції основних класів органічних сполук: алкани, галоїд-, азот-, сірковмісні їх похідні; алкени, карбонільні сполуки, їх гетероаналоги; алкіни, кумулени; бензол, заміщені бензоли, лінійні і конденсовані ароматичні сполуки; полієни, полііни, поліметини; гетероциклічні сполуки.

ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 2. Спектральна ідентифікація органічних сполук

Тема 6. Спектральні методи.

Ультрафіолетова спектроскопія та спектроскопія у видимій області.

Тема 7. Інфрачервона спектроскопія.

Інфрачервоний діапазон електромагнітних коливань та спектральних методів, що використовують даний діапазон довжин хвиль. Коливання атомів в молекулі, типи коливань.

Тема 8. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу

Будова атомного ядра. Спіни та спінові числа атомних ядер. Поведінка ядерного спіна в зовнішньому магнітному полі – ефект Зеемана. Розподіл Больцмана. Магнітно активні ядра та їх природний вміст.

Тема 9. Спектри ЕПР органічних радикалів

Спільні та відмінні риси в спектроскопіях ЯМР та ЕПР. Будова та принцип роботи спектрометра ЕПР. Структурні задачі спектроскопії ЕПР.

Ширина та форма ліній, чутливість та інформативність спектрів ЕПР. Поняття про g-фактор.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				
	усього	у тому числі			
		Лекції	Практичні	Самостійна робота	Консультації
1	2	3	4	5	7
Змістовий модуль 1. <u>Електронна спектроскопія органічних молекул</u>					
Тема 1.	7	2	-	5	-
Тема 2.	7	2	-	5	-
Тема 3.	9	2	-	5	2
Тема 4.	7	2	-	5	
Тема 5.	16	2	2	10	2
<i>Разом за змістовим модулем 1</i>	46	10	2	30	4
Змістовий модуль 2. <u>Спектральна ідентифікація органічних сполук</u>					
Тема 6.	12	2	2	6	2
Тема 7.	8	2	-	6	
Тема 8.	16	4	4	6	2
Тема 9.	8	2	-	6	
<i>Разом за змістовим модулем 2</i>	44	10	6	24	4
Усього годин	90	20	8	54	8

5. Теми практичних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Спектри поглинання і люмінесценції алканів, алкенів, алкінів, ароматичних і гетероциклічних сполук.	2
2	Загальні характеристики спектральних методів	2
3	Магнітні властивості елементів. Протонний магнітний резонанс (ПМР). Спектроскопія ЯМР ¹³ C.	4
Разом:		6

6. Тематика самостійної роботи.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Фотоніка у природі. Забарвленість рослин. Сприйняття кольору людиною і твариною.	5
2.	Нелінійні оптичні спектри. Двофотонне поглинання.	5
3.	Органічні люмінофори з високим стоксовим зсувом.	5
4.	Синглетний кисень: одержання, властивості, застосування.	5
5.	Фотодинамічна терапія. Ідеологія створення перспективних молекул для неї.	10
6.	Спектроскопія в УФ- та видимій області (УФ/Вид)	6
7.	Методологічні аспекти ІЧ-спектроскопії. Практичне застосування ІЧ-спектроскопії.	6
8.	Двовимірні спектри ЯМР. Спектроскопія ЯМР – методологічні аспекти. Менш традиційні ядра та експерименти в спектроскопії ЯМР. Спектроскопія ЯМР зразків у твердому стані.	6
9.	Фізичні основи та принципи спектроскопії ЕПР. Надтонкі взаємодії.	6
Разом		54

7. Додаткова робота

Вид індивідуальних завдань	Тематика індивідуальних завдань	Всього годин
Реферат	Хемілюмінесценція	30
	Флуоресцентні зонди в медицині і біології	
	Ізотопні ефекти в ІЧ-спектрах	
	Розчинники для спектроскопії ЯМР	
	Методи NOESY та ROESY	
	Метод DOSY та його застосування	

8. Методи навчання

Форми навчання: теоретичні, практичні, самостійна робота, консультації.

Методи навчання: словесні – лекція, пояснення, бесіда, on-line;

наочні – презентації, виконані із застосуванням програми PowerPoint;

практичні - лабораторні роботи, виконання вправ, завдань;

проблемно-пошукові методи – дискусія та колективне обговорення можливих підходів до вирішення задач чи експериментальних завдань

9. Форми контролю

Поточний контроль - усне опитування, участь в дискусії, виконання вправ, додаткова робота – індивідуальне творче завдання.

Підсумковий контроль – Залік.

10. Розподіл балів, які отримують аспіранти

Поточна самостійна та додаткова робота									Залік	Сума балів
Змістовний модуль №1					Змістовний модуль №2					
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9		
6	6	6	6	6	7,5	7,5	7,5	7,5	40	100

Критерії оцінювання успішності аспірантів (форма підсумкового контролю - залік)

35...40 балів ставиться аспіранту, який демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, знає суть предмету, його сучасний зміст та методологію, класифікацію природних сполук та їх основні біогенетичні шляхи синтезу, особливості будови, структурну різноманітність, хімічні та біологічні властивості природних сполук; вміє визначати належність природної сполуки до певного класу чи групи на основі класифікаційних ознак, а також виділяти структурні особливості, які визначають хімічні та біологічні властивості сполуки; має достовірний рівень розвитку умінь і навичок, що лежать в основі методів виявлення, вилучення, очистки та аналізу сполук рослинного походження; вільно володіє науковими термінами; вміє приймати необхідні рішення в нестандартних та має високу комунікативну культуру.

30...35 балів ставлять у тому випадку, якщо аспірант виявляє знання теоретичного програмного матеріалу і показує систематичний характер знань по всіх розділах програми, проте у відповідях є деякі недоліки, а саме: може описати структурну різноманітність основних класів природних сполук, але не чітко оцінює взаємозв'язок між будовою та властивостями природних сполук, не вміє прогнозувати хімічні та біологічні властивості сполук за їх структурою; орієнтується в способах виділення та в синтетичних методах одержання природних сполук, але не може зробити узагальнюючі висновки; допускає окремі несуттєві помилки і неточності; виникає необхідність задавати допоміжні питання.

24...30 балів виставляється аспіранту, який засвоїв основний навчальний матеріал, володіє необхідними вміннями та навичками для вирішення стандартних завдань, знає основні закономірності, але не зовсім чітко уявляє їх застосування, не виявляє самостійності суджень, не вміє сформулювати висновки.

0...24 балів ставиться аспіранту, який не володіє необхідними знаннями, вміннями, навичками, науковими термінами, демонструє низький рівень комунікативної культури.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
		для заліку
90 – 100	A	відмінно
82-89	B	добре
74-81	C	
64-73	D	задовільно
60-63	E	
35-59	FX	незадовільно з можливістю повторного складання
0-34	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

11. Рекомендована література

Базова:

1. Michael B.Smith, Jerry March. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure (Sixth Edition). - John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007. - 2357.
2. О.В. Свердлова. Электронные спектры в органической химии. – Ленинград, Химия, 1985. – 248с.
3. Дж. Бранд, Г. Эггинтон. применение спектроскопии в органической химии. – Москва, Мир, 1967. – 277с.
4. Ч.Н.Р. Рао. Электронные спектры в химии. – Москва, Мир, 1964. – 264с.
5. Э. Штерн. К. Тиммонс. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии. – Москва, Мир, 1974. – 295с.
6. А.Н. Теренин Фотоника молекул красителей и родственных соединений. Ленинград: Наука, 1967. - 616с.
7. Christian Reichardt. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry (Fourth, Updated and Enlarged Edition) WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2011. - 598p.
8. Ищенко А.А.. Строение и спектрально-люминесцентные свойства полиметиновых красителей. Киев: Наукова думка, 1994.- 232с.
9. Joseph R. Lakowiczю Principles of Fluorescence Spectroscopy. New York: Springer Science+Business Media, 2006. - 954p.
10. Ю.А. Пентин, Л.В.Вилков. Физические методы исследования в химии. М. Мир. 2003. – 683.
11. Воловенко Ю.М. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков/ Ю.М. Воловенко, В.Г. Карцев, И.В. Комаров, А.В.Туров, В.П. Хиля. - Москва: ICSPF, 2011. – 694 с
12. Казицына Л.А., Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектроскопии в органической химии / Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. – Москва: МГУ, 1979. – 237 с.
13. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М.: Мир, 1965. – 219 с.

14. Пул Ч. Техника ЭПР-спектроскопии: пер. с англ./ Ч. Пул. – М.: Мир, Москва, 1970. – 557 с.

15. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений/ Тарасевич Б.Н. Москва: МГУ, 2012. – 55 с

Допоміжна:

1. Давиденко Н.А., Ищенко А.А., Кувшинский Н.Г. Фотоника молекулярных полупроводниковых композитов на основе органических красителей. Киев: Наукова думка, 2005. - 296с.

2. Ищенко А.А., Грабчук Г.П. Физико-химические проблемы создания фотостабильных преобразователей световой энергии на основе окрашенных полимеров (Обзор). - Теорет. и эксперим. химия. 2009. Т.45. №3. С.133 - 155.

3. Стрижак П.Є. Квантова хімія: підручник. - Київ: Києво-Могилянська академія, 2009. - 458с.

4. Воловенко Ю.М. Ядерний магнітний резонанс: підручник для ВНЗ/ Ю.М. Воловенко, О.В. Туров. - Ірпінь: Перун, 2007. – 480 с

5. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. Пер. с англ.-М.: Мир, 1992.-403 с

6. Преч Э. Определение строения органических соединений: пер. с англ./ Э.Преч, Ф. Бюльман, К. Аффольтер. – М.: Бином, 2006. - 438 с.

7. Сильверстейн Р. Спектрометрическая интерпретация органических соединений: пер. с англ./ Р.Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином, 2011. – 557 с.

8. Толмачев В.Н. Электронные спектры поглощения органических соединений и их измерение: учебник для вузов/ В.Н.Толмачев. – Харків: Вища школа, 1974. - 295 с.

9. Беллами Л. Инфракрасные спектры молекул: пер. с англ./ Л. Беллами. – М.: Иностранная литература, 1957. - 444 с.

10. Ионин Б.И. ЯМР-спектроскопия в органической химии/ Б.И. Ионин, Б.А. Ершов, А.И. Кольцов. - Л.: Химия, 1983. - 272 с.

11. Леви Г. Руководство по ядерному магнитному резонансу углерода-13 для химиков-органиков: пер. с англ./ Г. Леви, Г. Нельсон. - М.: Мир, 1975. - 295с.
12. Штерн Э., Тиммонс Л. Электронные абсорбционные спектры в органической химии: пер. с англ./ Э.Штерн, Л.Тиммонс. - М.: Мир, 1974. - 315с.
13. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия/ А. Смит. - М.: Мир, 1982. - 328.
14. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. М.Ж Техносфера, 2007. - 368 с.
15. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР: пер с англ./ Х.Гюнтер. - М.: Мир, 1984. - 478 с.
16. Kwan E.E. Structural Elucidation with NMR Spectroscopy: Practical Strategies for Organic Chemists./ E.E. Kwan, S.G. Huang. - Eur. J. Org. Chem., 2008, p. 2671-2688.
17. Jacobsen N.E. NMR_Spectroscopy_Explained/ N.E. Jacobsen. - Hoboken: Wiley, 2007. - 668 p
18. Findeisen M. 50 and More Essential NMR Experiments/ M. Findeisen, S. Berger. - Weinheim: Wiley, 2014. - 308 p.
19. Solid_State_NMR_Spectroscopy. Principles and Applications/ M.J. Duer ed. - Oxford: Blackwell Science, 2002. - 567 p.
20. SpinWorks Documentation, Version 4.0.5 (2014/06/04)
21. Lund A. Principles and Applications of ESR Spectroscopy/ A. Lund, M. Shiotani, S. Shimada. - Dordrecht: Springer, 2011. 475 p.

Інформаційні ресурси

1. www.pubs.acs.org
2. www.rsc.org
3. www.springer.com
4. www.sciencedirect.com
5. www.scopus.com

6. www.webofknowledge.com
7. www.scholar.google.com
8. www.ep.espacenet.com
9. www.chemspider.com
10. omlc.org/spectra/
11. materials.springer.com/

**Календарно-тематичний план вивчення нормативної навчальної дисципліни
«ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК»**

Календарний план навчальних занять

Рівень вищої освіти Третій (освітньо-науковий)
 Галузь знань 10 – Природничі науки
 Спеціальність 102 – Хімія
 Рік навчання 2 -3
 Семестр 4-5



Затверджую

Директор Інституту органічної хімії НАН України
 акад. НАН України В.І. Кальченко

« 07 » 12 2020 р.

Кількість тижнів	40	Лекцій	20 год.
Практичних занять	8 год.	Самостійна робота	54 год.
Консультації	8 год.	Всього	90 год.

Теми лекцій	го д	Теми практичних (лабораторних) занять	год	Теми самостійних робіт	год
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 1. Електронна спектроскопія органічних молекул					
Тема 1. Електронна спектроскопія: визначення, коло проблем і можливості. Визначення поняття електронної спектроскопії і кола проблем, які вона вивчає. Її місце серед інших видів спектроскопії. Хвильові та енергетичні характеристики. Фізика і хімія зору. Фізична теорія кольоровості. Закон Бугера – Ламберта – Бера. Експериментальне реєстрування електронних спектрів поглинання і люмінесценції.	2			Фотоніка у природі. Забарвленість рослин. Сприйняття кольору людиною і твариною.	5
Тема 2. Ключові принципи електронної спектроскопії. Принцип Франка – Кондона та наслідки з нього для спектрів поглинання та люмінесценції. Правило Каша, закони Вавілова, Льовшина та Стокса.	2			Нелінійні оптичні спектри. Двофотонне поглинання.	5
Тема 3. Випромінювальні і безвипромінювальні шляхи дезактивації електронно-збуджених станів органічних молекул. Діаграма Яблонського. Синглетний і триплетний стани. Коливальна релаксація, внутрішня і інтеркомбінаційна конверсія, флуоресценція і фосфоресценція.	2			Органічні люмінофори з високим стоксовим зсувом.	5
Тема 4. Сольватохромія і асоціація органічних молекул. Вплив природи середовища на електронні спектри органічних молекул. Позитивна і негативна сольватохромія. Асоціація молекул. Н- та J- агрегати.	2			Синглетний кисень: одержання, властивості, застосування.	5
Тема 5. Електронні спектри основних класів органічних молекул. Типи електронних переходів. Спектри поглинання і флуоресценції	2	Спектри поглинання і люмінесценції алканів, алкенів,	2	Фотодинамічна терапія. Ідеологія створення перспективних молекул для неї.	10

основних класів органічних сполук: алкани, галоїд-, азот-, сірковмісні їх похідні; алкени, карбонільні сполуки, їх гетероаналоги; алкіни, кумулени; бензол, заміщені бензоли, лінійні і конденсовані ароматичні сполуки; полієни, полііни, поліметини; гетероциклічні сполуки.		алкінів, ароматичних і гетероциклічних сполук.			
Змістовний модуль 2. Спектральна ідентифікація органічних сполук					
Тема 6. Спектральні методи. Ультрафіолетова спектроскопія та спектроскопія у видимій області.	2	Загальні характеристики спектральних методів	2	Спектроскопія в УФ- та видимій області (УФ/Вид)	6
Тема 7. Інфрачервона спектроскопія. Інфрачервоний діапазон електромагнітних коливань та спектральних методів, що використовують даний діапазон довжин хвиль. Коливання атомів в молекулі, типи коливань.	2			Методологічні аспекти ІЧ-спектроскопії. Практичне застосування ІЧ-спектроскопії.	6
Тема 8. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу. Будова атомного ядра. Спіни та спінові числа атомних ядер. Поведінка ядерного спіна в зовнішньому магнітному полі – ефект Зеемана. Розподіл Больцмана. Магнітно активні ядра та їх природний вміст.	4	Магнітні властивості елементів. Протонний магнітний резонанс (ПМР). Спектроскопія ЯМР ¹³ С.	4	Двовимірні спектри ЯМР. Спектроскопія ЯМР – методологічні аспекти. Менш традиційні ядра та експерименти в спектроскопії ЯМР. Спектроскопія ЯМР зразків у твердому стані.	6
Тема 9. Спектри ЕПР органічних радикалів. Спільні та відмінні риси в спектроскопіях ЯМР та ЕПР. Будова та принцип роботи спектрометра ЕПР. Структурні задачі спектроскопії ЕПР. Ширина та форма ліній, чутливість та інформативність спектрів ЕПР. Поняття про g-фактор.	2			Фізичні основи та принципи спектроскопії ЕПР. Надтонкі взаємодії.	6
	20		8		54

Науково-педагогічні працівники _____ чл.-кор. НАН України О.О. Іщенко

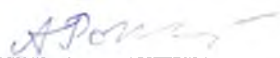
_____ д.х.н., ст.н.с. О.Б. Роженко

основних класів органічних сполук: алкани, галоїд-, азот-, сірковмісні їх похідні; алкени, карбонільні сполуки, їх гетероаналоги; алкіни, кумулени; бензол, заміщені бензоли, лінійні і конденсовані ароматичні сполуки; полієни, полііни, поліметини; гетероциклічні сполуки.		алкінів, ароматичних і гетероциклічних сполук.			
Змістовний модуль 2 <i>Спектральна ідентифікація органічних сполук</i>					
Тема 6. Спектральні методи. Ультрафіолетова спектроскопія та спектроскопія у видимій області.	2	Загальні характеристики спектральних методів	2	Спектроскопія в УФ- та видимій області (УФ/Вид)	6
Тема 7. Інфрачервона спектроскопія. Інфрачервоний об'єктив спектроскопічних коливань та спектроскопія. Частоти, які відповідають даній діапазон довжин хвиль. Колювання атомів в молекулі, типи коливань.	2			Методологічні аспекти ІЧ-спектроскопії. Практичне застосування ІЧ-спектроскопії.	6
Тема 8. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу. Будова атомного ядра. Спіни та спінові числа атомних ядер. Поведінка ядерного спіна в зовнішньому магнітному полі – ефект Зеемана. Розподіл Больцмана. Магнітно активні ядра та їх природний вміст.	4	Магнітні властивості елементів. Протонний магнітний резонанс (ПМР). Спектроскопія ЯМР ¹³ C.	4	Двовимірні спектри ЯМР. Спектроскопія ЯМР – методологічні аспекти. Менш традиційні ядра та експерименти в спектроскопії ЯМР. Спектроскопія ЯМР зразків у твердому стані.	6
Тема 9. Спектри ЕПР органічних радикалів. Спільні та відмінні риси в спектроскопіях ЯМР та ЕПР. Будова та принцип роботи спектрометра ЕПР. Структурні задачі спектроскопії ЕПР. Ширина та форма ліній, чутливість та інформативність спектрів ЕПР. Поняття про g-фактор.	2			Фізичні основи та принципи спектроскопії ЕПР. Надтонкі взаємодії.	6
	20		8		54

Науково-педагогічні працівники _____



чл.-кор. НАН України О.О. Іщенко



д.х.н., ст.н.с. О.Б. Роженко

ПИТАННЯ ДО ЗАЛІКУ

1. Запропонуйте шляхи створення молекул з високими стоксовими зсувами.
2. Діаграма Яблонського.
3. Що таке батохромний, гіпсохромний, гіперхромний та гіпохромний ефекти?
4. В яких випадках порушується закон дзеркальної симетрії спектрів поглинання і люмінесценції?
5. Закон Ламберта - Бугера - Бера
6. Вимушені електронні переходи. Інверсна населеність. Лазери.
7. Форма смуг поглинання та випромінювання.
8. Трикольорова теорія зору.
9. Сформулюйте і обґрунтуйте правило Стокса.
8. Внутрішня та інтеркомбінаційна конверсія.
9. Правило Каша.
10. Синглетний кисень, властивості, застосування.
11. Як відрізнити флуоресценцію від фосфоресценції?
12. Адитивний та субтрактивний методи одержання кольору.
13. Правило Льовшина (Лёвшина).
14. Принцип Франка - Кондона.
8. Фотодинамічна терапія, принцип дії. застосування.
15. Закон С.І. Вавілова.
16. Чому спектри люмінесценції вимірюються в сильно розведених розчинах?
17. Інтенсивність вібронних переходів.
18. Сповільнена люмінесценція. Типи сповільненої люмінесценції.
19. Сформулюйте критерії створення молекул з високими квантовими виходами флуоресценції.
9. Чотирьохрівнева схема електронних станів.
20. Чи залежить квантовий вихід люмінесценції від довжини хвилі збудження?
21. Дезактивація збудженого стану. Випромінювальні та безвипромінювальні процеси.
22. Пікова та інтегральна інтенсивність смуг. Одиниці вимірювання.

23. Квантовий вихід люмінесценції.
24. Вібронні прогресії. Контур смуг поглинання і флуоресценції.
25. Електронні спектри гетероциклічних сполук. П'яти- та шестичленні ненасичені гетероцикли.
26. Позитивна, негативна та обернена сольватохромія і сольватофлуорохромія
27. Електронні спектри алканів та їх похідних. Галоїдзаміщені сполуки, спирти, меркаптани, аміни, етери.
28. Електронні спектри алкенів, карбонільних та карбоксильних сполук, тіакарбонільних сполук, азометинів, нітро- та нітрозосполук.
29. Електронні спектри алкінів, поліалкінів, кумуленів.
30. Електронні спектри спряжених полієнових систем.
31. Електронні спектри ароматичних сполук.
32. Електронні спектри карбонільних та азометипових сполук.
33. Електронні спектри гетероциклічних сполук.
34. Електронні спектри лінійних та ангулярних конденсованих ароматичних сполук.
35. Електронні спектри заміщених бензолів.
36. Асоціація молекул. Н- та J- агрегати.
37. Електронні спектри органічних барвників. Класифікація. Поняття про хромофори та ауксохроми.
38. Закон Бугера-Ламберта-Берра.
39. Правило Скотта.
40. Фур'є-спектроскопія, її переваги.
41. Ізотопні ефекти в ІЧ-спектрах.
42. Загальна схема та основні вузли спектрометра ЯМР.
43. Вимірювання часів релаксації T_1 методом інверсії-відновлення, вимірювання T_2 методом спінової луни.
44. Методики засновані на ЯЕО, використання ЯЕО для розв'язання структурних задач.
45. Кріодатчики.

46. Метод DOSY та його застосування.
47. Крос-поляризація. Двовимірні спектри ЯМР зразків у твердому стані.
48. Спільні та відмінні риси в спектроскопіях ЯМР та ЕПР.
49. Елементарна теорія ширини ліній в спектрах ЕПР.
50. Будова та принцип роботи спектрометра ЕПР.