

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи

“ _____ ” _____ 2018 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

СУЧАСНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА АНАЛІЗУ МАТЕРІАЛІВ

рівень вищої освіти магістр

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 Хімія

освітня програма освітня-професійна програма “Хімія”

вид дисципліни за вибором

факультет хімічний

2018 / 2019 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету

“ 31 ” серпня 2018 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Шкумат Анатолій Петрович, канд. хімічних наук, доцент кафедри хімічного матеріалознавства;

Рошаль Олександр Давидович, канд. хімічних наук, доцент кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “31 ” серпня 2018 року № 1

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

_____ Коробов О.І.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “ 31 ” серпня 2018 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ Єфімов П.В.
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Сучасні методи дослідження та аналізу матеріалів» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки другого рівня вищої освіти – магістр

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

спеціальності (напрямку) 102 – хімія

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни – спецкурсу «Сучасні методи дослідження та аналізу матеріалів» є вивчення основних тенденцій сучасного розвитку фізичних та фізико-хімічних методів визначення структури речовин та їх застосування в хімічному матеріалознавстві, основних принципів встановлення структури молекул з використанням електронної спектроскопії, інфрачервоної спектроскопії, ядерного магнітного резонансу тощо.

Глибокі знання методів дослідження та аналізу (за допомогою сучасних спектральних приладів) органічних речовин, полімерних та інших, в першу чергу, функціональних матеріалів, які реально використовуються в науковій, технологічній і повсякденній діяльності людини, дозволяють знаходити та коректно встановлювати залежність між фізичними (в першу чергу спектральними) і хімічними властивостями та структурою молекул речовин, ефективно вирішувати прикладні задачі.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

Надати та розвинути теоретичні уявлення та сформувати тверді практичні навички з фізичних методів дослідження, які використовуються під час дослідження хімічних матеріалів. Надати можливість відповідного тренування візуального сприйняття і інтерпретації даних досліджень, оцінки їх якості, розвитку елементів зорової пам'яті.

Поглиблене вивчення специфічних прийомів і комплексного їх використання під час дослідження органічних речовин різних класів, які реально використовуються в найрізноманітніших сферах діяльності людей, формування практичних навичок і вмій проведення складних фізико-хімічних досліджень хімічних сполук.

1.3. Кількість кредитів - 7

1.4. Загальна кількість годин – 210

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	1-й
Семестр	
1-й	1-й
Лекції	
16 год.	10 год.
Лабораторні заняття	
48 год.	10 год.
Самостійна робота	
146 год.	190 год.
Індивідуальні завдання	
не передбачено	не передбачено

1.6. Заплановані результати навчання

В результаті проходження спецкурсу «Сучасні методи дослідження та аналізу матеріалів» студент повинен набути такі практичні навички, уміння, універсальні та професійні компетенції:

знати:

- засади фізичних та фізико-хімічних методів визначення структури молекул і комплексного їх використання.
- правила перевірки, юстування і налаштування фотоколориметрів і спектрофотометрів;
- сучасні методи аналізу і обробки експериментальних результатів та вміння візуально сприймати і інтерпретувати дані досліджень, оцінювати їх якість;
- знати основні тенденції сучасного розвитку фізичних та фізико-хімічних методів визначення структури речовин і їх використання в хімічному матеріалознавстві
- сучасні методи дослідження та аналізу чистих органічних речовин, полімерних та інших функціональних матеріалів, які реально використовуються в найрізноманітніших сферах діяльності людей та вміння проводити такі дослідження

мати:

- уявлення про умови виникнення спектрів поглинання та освоїти методи аналізу електронних| спектрів поглинання;
- чітке уявлення про призначення, фізичний принцип роботи і особливості застосування спектральних приладів, їх функціональні можливості;
- сучасні уявлення про можливості електронної спектроскопії під час наукових досліджень хімічних сполук і матеріалів у навчальних|, наукових|, експертних| дослідженнях та хімічному матеріалознавстві;

уміти:

- самостійно проводити вимірювання, запис спектрів і складання звіту, наукової доповіді і т. п., захищати результати своїх досліджень;
- оцінити надійність своїх вимірювань, правильно представити результат, враховуючи систематичні (методичні, інструментальні та індивідуальні), випадкові та грубі похибки;
- оформити отримані результати за правилами оформлення наукових досліджень та за результатами власних досліджень формулювати оцінки проведених досліджень (учбові, наукові, експертні);
- проводити самостійні дослідження з так званим «відкритим кінцем», тобто після виконання стандартних завдань змінити хід спостереження, скласти методичку для аналогічного дослідження інших сполук|, матеріалів і т. д., демонструвати здатність породжувати нові ідеї, самостійно ставити конкретні завдання наукових досліджень в області хімії та вирішувати їх за допомогою сучасної апаратури, устаткування, інформаційних технологій з використанням новітнього вітчизняного і зарубіжного досвіду.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1 . Організація роботи сучасної лабораторії з дослідження матеріалів

Тема 1. Планування, підготовка і проведення хімічних, фізико-хімічних та фізичних досліджень матеріалів.

Основні засади фізичних та фізико-хімічних методів визначення структури молекул і комплексного їх використання.

Тема 2. Спектральні прилади і устаткування.

Призначення, фізичний принцип роботи і особливості застосування спектральних приладів, їх функціональні можливості. Оптичні схеми сучасних фотоколориметрів та спектрофотометрів. Правила перевірки, юстування і налаштування фотоколориметрів і спектрофотометрів. Надійність вимірювань, представлення результатів, систематичні (методичні,

інструментальні та індивідуальні), випадкові та грубі похибки. Техніка безпеки в спектральній лабораторії.

Розділ 2. Стратегія проведення фізичних, фізико-хімічних та хімічних досліджень матеріалів

Тема 1. Електронні спектри

Походження електронних спектрів. Достатні умови спостереження електронних спектрів і способи зображення електронних спектрів. Структура органічних молекул та електронні спектри. Хромофори та ауксохроми. Форма смуг поглинання, батохромне та гіпсохромне зміщення смуг поглинання, інтенсивність поглинання. Характеристика вибіркового поглинання різних структурних елементів органічних молекул. Загальна характеристика спектрофотометрів та спектрометрів.

Тема 2. Спектри люмінесценції

Випромінювальні переходи. Флуоресценція. Внутрішня конверсія. Правило Стокса. Фосфоресценція. Інтеркомбінаційний перехід. Хімічні шляхи дезактивації. Внутрішньомолекулярні перегрупування, фото-ізомеризація. Термолюмінесценція, триболюмінесценція, радіолюмінесценція, хемілюмінесценція, електрохемілюмінесценція та ін.

Тема 3. Інфрачервоні спектри

Природа коливальних спектрів. Поняття про валентні та деформаційні коливання. Теорія коливальних спектрів: коливання гармонічного осцилятора; фундаментальні переходи в коливальних спектрах хімічних сполук; нормальні коливання; силова стала, співвідношення між силовою сталою, довжиною та кратністю зв'язку; ймовірність переходів в ІЧ та інтенсивність смуг в ІЧ-спектрах; характеристичність коливань молекул за частотою, формою та інтенсивністю. Залежність коливальних спектрів від хімічної будови молекул. Вибір оптимальних умов реєстрації ІЧ спектрів. Найбільш поширені недоліки інфрачервоних спектрограм. Найважливіші характеристичні смуги поглинання в області основних частот коливань органічних молекул. Проведення структурного аналізу за ІЧ спектрами. Залежність коливальних спектрів від хімічної будови молекул полімерів.

Тема 4. Спектри протонного магнітного резонансу

Хімічний зсув та його вимірювання. Константи спин-спінової взаємодії. Класифікація спектрів ПМР. Залежність спектрів ПМР від умов реєстрації. Загальні рекомендації з аналізу спектрів ПМР під час структурного аналізу.

Місце ядерного магнітного резонансу та електронного парамагнітного резонансу в дослідженні полімерів. Опис поведінки ядер речовини в магнітному полі. Форма ліній поглинання. Спектри ЯМР та будова молекул. ЯМР-спектроскопія широких ліній. Тонка структура ЯМР-спектрів. ЯМР-спектроскопія високої роздільної здатності.

Тема 5. Спектри ядерного магнітного резонансу ¹³C

Умови реєстрації спектрів ЯМР ¹³C. Рекомендації з розшифровки спектрів ЯМР ¹³C.

Тема 6 Мас-спектрометрія

Принцип утворення мас-спектрів. Загальна характеристика приладів, які використовуються для реєстрації мас-спектрів. Вибір оптимальних умов запису мас-спектрів. Загальні закономірності фрагментації органічних молекул під час електронного удару. Інтерпретація мас-спектрів під час структурного аналізу

3. Структура навчальної дисципліни

1	Денна форма						Заочна форма					
	Усього	у тому числі					Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	ср		л	п	лаб	інд	ср
2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	
<i>Розділ 1. Організація роботи сучасної лабораторії з дослідження матеріалів</i>												
<i>Тема 1</i>	0,5	0,5					0,5	0,5				
<i>Тема 2</i>	6,5	2,5				4	0,5	0,5				
Разом за розділ 1	7	3				4	1	1				
<i>Розділ 2. Стратегія проведення фізичних, фізико-хімічних та хімічних досліджень матеріалів</i>												
<i>Тема 1</i>	43	5		8		30	47	3		4		40
<i>Тема 2</i>	32	4		8		20	33	3				30
<i>Тема 3</i>	41	1		10		30	45	1		4		40
<i>Тема 4</i>	31	1		10		20	31	1				30
<i>Тема 5</i>	23	1		2		20	30,5	0,5				30
<i>Тема 6</i>	23	1		2		20	15,5	0,5				15
<i>Тема 1 – 6 Комплексне завдання</i>	11	1		8		2	7			2		5
Разом за розділ 2	203	13		48		142	209	9		10		190
Усього годин	210	16		48		146	210	10		10		190

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		Ден.	Заоч.
1	Спектральні прилади і устаткування. Призначення, фізичний принцип роботи і особливості застосування спектральних приладів, їх функціональні можливості. Оптичні схеми сучасних фотоколориметрів та спектрофотометрів. Правила повірки, юстування і налаштування фотоколориметрів і спектрофотометрів.	4	4
2	Робота з фотометричним обладнанням: реєстрація і обробка спектрів поглинання. Достатні умови спостереження електронних спектрів і способи зображення електронних спектрів.	4	
3	Спектральні прилади та устаткування для реєстрації спектрів випромінення (флуоресценція, фосфоресценція). Правила роботи на флуорометрах. Реєстрація і обробка спектрів флуоресценції та фосфоресценції.	4	
4	Отримання та обробка спектрів збудження флуоресценції та синхронних спектрів. Розрахунки експериментальних величин, що характеризують молекули у збудженому стані: енергія 0-0 переходу, Стоксів зсув, квантовий вихід тощо.	4	

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		Ден.	Заоч.
7	Визначення вмісту металів із використанням реакцій комплексоутворення	4	
8	Харчові барвники в продуктах харчування та лікарських засобах – виявлення та встановлення концентрації	4	
9	Інфрачервона спектроскопія	10	4
10	Спектроскопія ядерного магнітного резонансу	12	
11	Мас-спектрометрія	2	
12	Комплексне дослідження та аналіз матеріалів.	8	2
	Разом	48	10

5. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		Ден.	Заоч.
<i>Розділ 1. Організація роботи сучасної лабораторії з дослідження матеріалів</i>		4	-
<i>Розділ 2. Стратегія проведення фізичних, фізико-хімічних та хімічних досліджень матеріалів</i>			
2	<i>Тема 1. Електронні спектри</i>	30	40
3	<i>Тема 2. Спектри люмінесценції</i>	20	30
4	<i>Тема 3. Інфрачервоні спектри</i>	30	40
5	<i>Тема 4. Спектри протонного магнітного резонансу</i>	20	30
6	<i>Тема 5. Спектри ядерного магнітного резонансу ¹³C</i>	20	30
7	<i>Тема 6 Мас-спектрометрія</i>	20	15
8	<i>Тема 1 – 6. Комплексне використання спектральних даних</i>	2	5
	Разом	146	190

6. Індивідуальні завдання

Індивідуальні завдання не передбачені.

7. Методи контролю

Контроль знань - контрольна робота за лекційним курсом та поточний контроль на лабораторному практикумі, захист виконаних лабораторних робіт, іспит.

Поточний контроль знань, необхідних для успішного і **безпечного** виконання лабораторної роботи здійснюється перед кожною лабораторною роботою; **лабораторні роботи виконуються індивідуально**; **захист лабораторних робіт** включає оформлення звіту про виконання роботи (згідно умов практикуму).

По завершенню вивчення дисципліни складається **письмовий іспит**.

Форми поточного контролю:

а) **Контроль систематичності роботи** студентів здійснюється у формі короткотермінових (5 – 10 хвилин) письмових контрольних робіт на лабораторних заняттях з метою активізації систематичної роботи студентів і перевірки готовності кожного студента до виконання завдань лабораторного практикуму.

б) **Контроль проходження практикуму** здійснюється у формі письмової перевірки знання теоретичного матеріалу, перевірки знання порядку виконання експерименту, правил техніки безпеки, контролю за виконанням роботи та перевірки оформлення звітів в лабораторному журналі.

в) **Умовою допуску до іспиту** є виконання і захист усіх запланованих лабораторних робіт, успішне проходження тестування (проходження поточного контролю) протягом усього терміну виконання спецпрактикуму.

Зміст, об'єм практичних занять та оцінювання звітності:

1. Дослідження електронних спектрів поглинання і люмінесценції (перевірка працездатності приладів, дослідження спектрів речовин, що знаходяться у рідкому, склоподібному станах та у плівках, аналіз спектральних кривих).

Спектральні прилади і устаткування. Призначення, фізичний принцип роботи і особливості застосування спектральних приладів, їх функціональні можливості. Оптичні схеми сучасних фотоколориметрів та спектрофотометрів. Правила повірки, юстування і налаштування фотоколориметрів і спектрофотометрів.	3 бала
Робота з фотометричним обладнанням: реєстрація і обробка спектрів поглинання. Достатні умови спостереження електронних спектрів і способи зображення електронних спектрів.	3 бала
Спектральні прилади та устаткування для реєстрації спектрів випромінення (флуоресценція, фосфоресценція). Правила роботи на флуорометрах. Реєстрація і обробка спектрів флуоресценції та фосфоресценції.	3 бала
Отримання та обробка спектрів збудження флуоресценції та синхронних спектрів. Розрахунки експериментальних величин, що характеризують молекули у збудженому стані: енергія 0-0 переходу, Стоксів зсув, квантовий вихід тощо.	3 бала
Використання спектрів поглинання та випромінення для структурної ідентифікації функціональних матеріалів	3 бала
Математичний аналіз структури спектрів поглинання та випромінювання органічних і неорганічних речовин	3 бала
Визначення вмісту металів із використанням реакцій комплексоутворення	3 бала
Харчові барвники в продуктах харчування та лікарських засобах – виявлення та встановлення концентрації	3 бала

- **24 балів**

2. Дослідження інфрачервоних спектрів поглинання (речовин, що знаходяться у газоподібному, рідкому та твердому стані, плівкових полімерних матеріалів, аналіз спектральних кривих тощо)

- **10 балів**

3. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу (аналіз спектрів ПМР та ЯМР ¹³C)

- **10 балів**

4. Комплексне дослідження та аналіз матеріалів (з використанням усіх доступних методів дослідження матеріалів)

- **16 балів**

По закінченню курсу проводиться **письмовий іспит** - **40 балів**.

8. Розподіл балів, які отримують студенти

(Шкала оцінювання)

Поточний контроль					Екзамен	Сума
ЕС	ІЧ	ЯМР	Компл. Завд.	Разом		
24	10	10	16	60	40	100

#**Мінімальний бал**, отриманий студентом на іспиті, має бути **не менше 20 балів**.

Залежно від загального підсумкового балу встановлюються наступні критерії оцінювання:

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно
70-89	добре
50-69	задовільно
1-49	незадовільно

Критерій оцінювання:

Оцінка **“відмінно” (90 – 100 балів)** - студент вільно володіє матеріалом відповідно до наведеної програми і може творчо використовувати свої знання.

Оцінка **“добре”(79– 89 балів)**- студент має теоретичні знання відповідно до програми, але практичні питання нерідко вирішує помилково.

Оцінка **“задовільно” (59 – 69 балів)** – студент освоїв курс, але непереконливо відповідає, путає поняття, додаткові питання викликають невпевненість або відсутність стабільних знань, відповідаючи на питання практичного характеру, виявляє неточності у знаннях, не вміє оцінювати факти та явища тощо.

Оцінка **“незадовільно” (менше ніж 50 балів)** – студент не опанував навчальний матеріал дисципліни, не знає наукових фактів, визначень, майже не орієнтується в рекомендованій літературі, відсутні наукове мислення, практичні навички не сформовані та отримав

9. Рекомендована література Базова

1. Драго Р. Физические методы в химии. Т. 1 - М.: Мир, 1981 – 424с.
2. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. – М.: Мир, 1982, 328с.
3. Юинг Г. Инструментальные методы химического анализа. М.: Мир, 1989. – 608с.
4. Сильверстейн Р., Басслер Г., Моррил Т. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Мир, 1977. – 592с.
5. Инструментальные методы анализа функциональных групп органических соединений/ Под ред. С. Сиггиа. – М.: Мир, 1974. -464с.
6. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Мир,1987. -368с.
7. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. – М.: Высш. шк., 1984. – 336с.
8. Лебедев В.В. Техника оптической спектроскопии. М: Изд. МГУ,1986. – 352с.
9. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии.- М.: Мир, 1985. – 386с.
10. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Л.: Химия, 1985. – 248с.
11. Берштейн И.Я., Каминский Ю.Л. Спектрофотометрический анализ в органической химии. Л.: Химия, 1986. – 200с.
12. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островський Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1976. – 392с.
13. Бахшиев Н.Г. Введение в молекулярную спектроскопию. – Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1974, 182с.
14. Толмачев В.Н. Электронные спектры поглощения органических соединений и их измерение. Харьков: Вища школа, 1974. – 160с.

15. Золотов Ю.А., Дорохова Е.Н., Фадеева В.И. и др. Основы аналитической химии. В 2-х кн. /Под ред. Акад. Ю.А.Золотова – Кн. 2. Методы химического анализа. М.: Высшая школа, 2002. – 495с.
16. Пентин Ю. А. Основы молекулярной спектроскопии – М. : Мир, 2008. – 400 с.
17. Васильев В. П. Аналитическая химия. Часть 2. Физико-химические методы анализа М.: Высш. шк., 1989, 320 с.
18. Вязьмин С. Ю., Рябухин Д. С., Васильев А. В. Электронная спектроскопия соединений. Учебное пособие для студентов химических и химико-технологических специальностей высших учебных заведений СПб.: СПбГЛТА, 2011, 43 с.
19. Лёвшин Л.В., Салецкий А.М. Люминесценция и ее измерение. – М.: Изд-во МГУ, 1989. – 272с.
20. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. – М.: Мир, 1986. – 496с.
21. Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. Органические люминофоры. – М.: Химия, 1984. – 336с.
22. Лазеры на красителях. / Под ред. Ф.П.Шефера. - М.: Мир, 1976. – 330с.
23. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М.: Мир, 1965. – 216с.
24. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул. – М.: ИЛ, 1963, 590с.
25. Беллами Л. Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул. – М.: Мир, 1971, 318с
26. Инфракрасная спектроскопия полимеров. - М.: Химия, 1978. - 472с.
27. Казицина Л.А., Калявин В.А. Задачник по спектрохимической идентификации органических соединений /МГУ, хим. фак – М.: Моск. ун-т, 1991. – 136с.
28. Шкумат А. П. Електронна спектроскопія в хімічних дослідженнях та в хімічному матеріалознавстві. Лабораторний практикум : навчальний посібник / А. П. Шкумат. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2015. – 168с., іл. 8

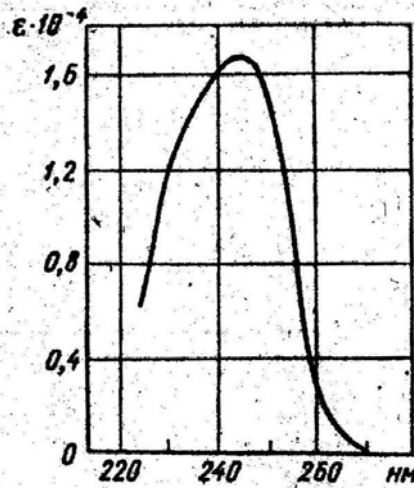
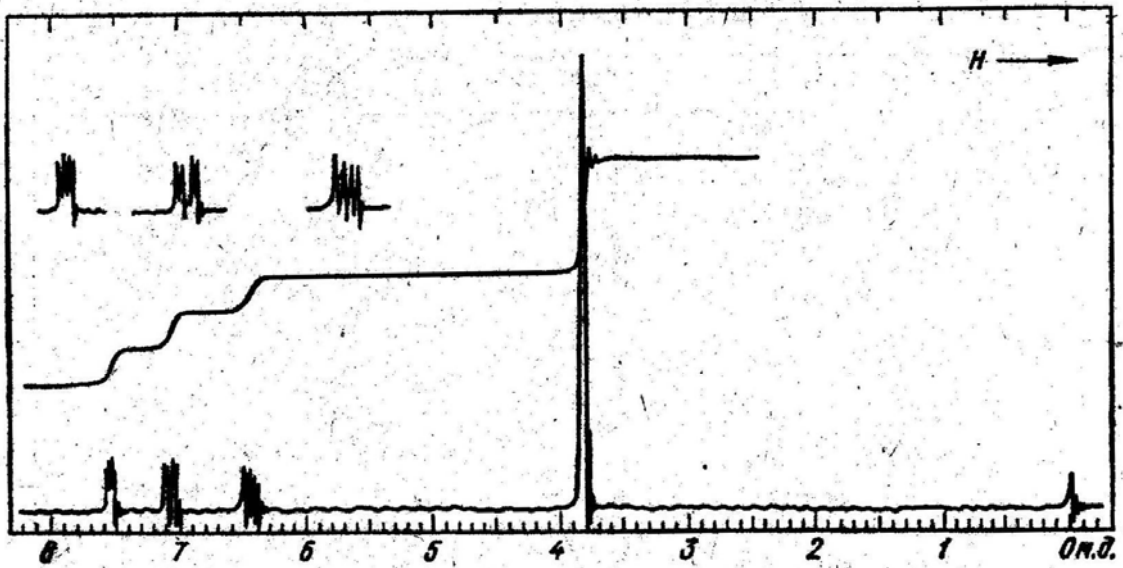
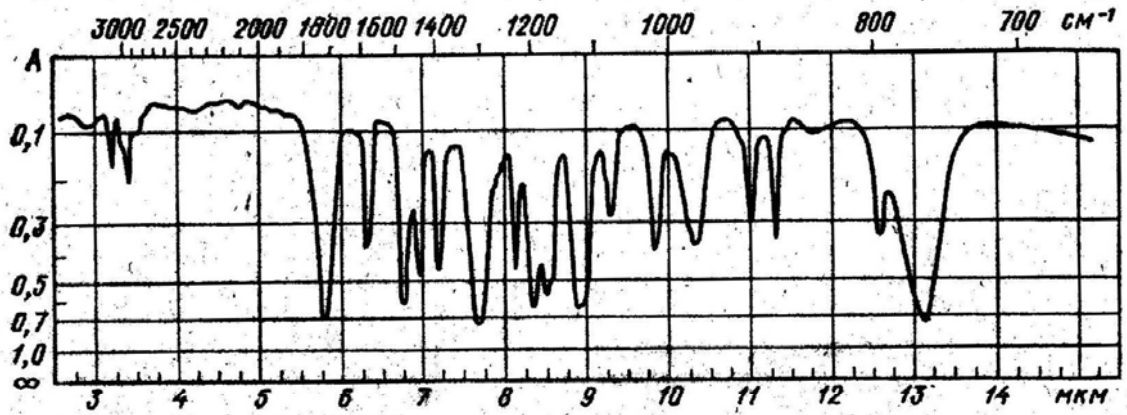
Лабораторні заняття

№ з/п	Назва теми	Зміст ЛР
1	Спектральні прилади і устаткування. Призначення, фізичний принцип роботи і особливості застосування спектральних приладів, їх функціональні можливості. Оптичні схеми сучасних фотоколориметрів та спектрофотометрів. Правила повірки, юстування і налаштування фотоколориметрів і спектрофотометрів.	Повірка, юстування і налаштування фотоколориметрів і спектрофотометрів
2	Робота з фотометричним обладнанням: реєстрація і обробка спектрів поглинання. Достатні умови спостереження електронних спектрів і способи зображення електронних спектрів.	Реєстрація і обробка та аналіз спектрів поглинання
3	Спектральні прилади та устаткування для реєстрації спектрів випромінювання (флуоресценція, фосфоресценція). Правила роботи на флуорометрах. Реєстрація і обробка спектрів флуоресценції та фосфоресценції.	Реєстрація і обробка та аналіз спектрів флуоресценції та фосфоресценції.
4	Отримання та обробка спектрів збудження флуоресценції та синхронних спектрів. Розрахунки експериментальних величин, що характеризують молекули у збудженому стані: енергія 0-0 переходу, Стоксів зсув, квантовий вихід тощо.	Отримання та обробка спектрів збудження флуоресценції та синхронних спектрів
7	Визначення вмісту металів із використанням реакцій комплексоутворення	ЛР № 6,7 та 10*
8	Харчові барвники в продуктах харчування та лікарських засобах – виявлення та встановлення концентрації	ЛР № 9*
9	Інфрачервона спектроскопія	Обробка та аналіз спектрів
10	Спектроскопія ядерного магнітного резонансу	Обробка та аналіз спектрів
11	Мас-спектрометрія	Обробка та аналіз спектрів
12	Комплексне дослідження та аналіз матеріалів.	Робота зі спектрами**

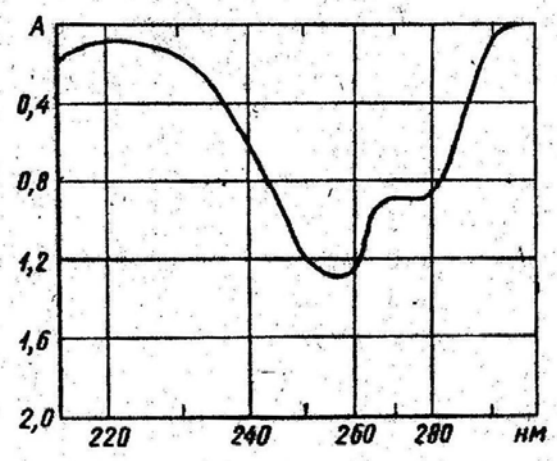
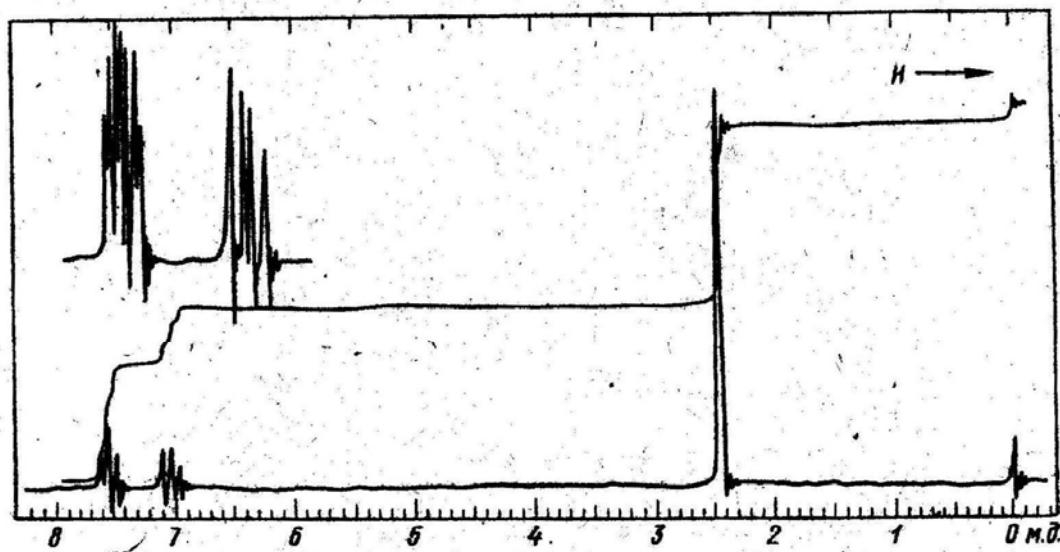
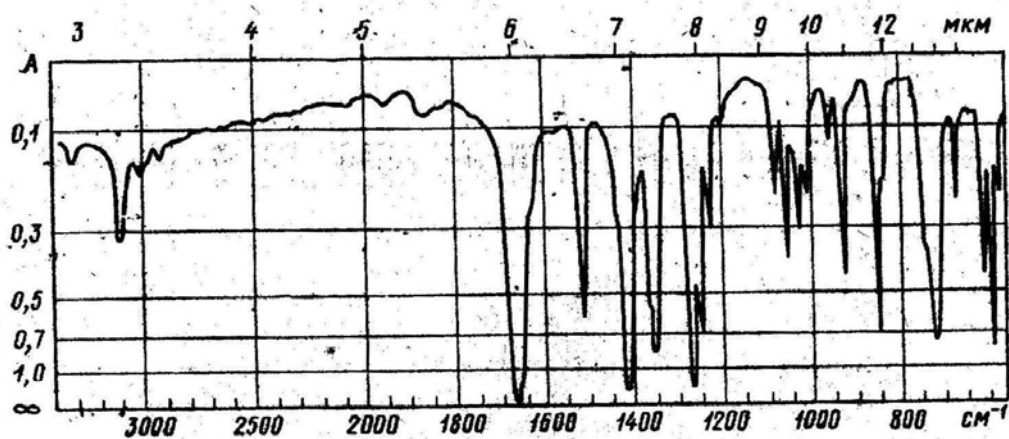
*Виконання лабораторних робіт у відповідності до описання ЛР в навчальному посібнику:

Шкумат А. П. Електронна спектроскопія в хімічних дослідженнях та в хімічному матеріалознавстві. Лабораторний практикум : навчальний посібник / А. П. Шкумат. – Х. : ХНУімені В. Н. Каразіна, 2015. – 168 с., іл. 9.

Приклад комплексного задания



Спектры соединения C₈H₆O₃



ИК-, УФ- и ПМР-спектры соединения C_6H_6OS :
 ИК-спектр — в тонком слое, УФ-спектр — в гексане, 0,085 г/л, кювета 0,2 см

Приклад тестового завдання перевірки знань з курсу

1	2
	<p><u>Знайдіть хибне судження: Ізобестична точка – загальна точка перетинання спектральних кривих, що може появлятися при зміні параметрів, які діють на стан спектрально досліджуваної системи:</u></p> <p>A: концентрації досліджуваної речовини; Б: розчинника; В: рН; Г: тиску.</p>
	<p><u>Вказати загальноприйняті значення величин оптимальних значень оптичної густини (D_{opt}) та робочий інтервал оптичної густини під час спектрофотометричних вимірювань:</u></p> <p>A: 0,51; 0,5-0,8; Б: 0,25; 0,2-0,7; В: 0,4343; 0,2-0,7; Г: 0,8; 0,2-1,7.</p>
	<p><u>Вказати значення характеристичної частоти поглинання карбонильної групи ($\tilde{\nu}_{C=O}$) ароматичних альдегідів:</u></p> <p>A: 920-965; Б: 1280-1315; В: 1620-1700; Г: 1690-1715.</p>
	<p><u>Вказати, які ізотопи не мають магнітних властивостей і для них не використовується метод ядерного магнітного резонансу:</u></p> <p>A: ^{12}C; Б: ^2H; В: ^{15}N; Г: ^{31}P.</p>
	<p><u>В мас-спектрах не реєструються:</u></p> <p>A: молекулярні йони; Б: первинні осколочні йони; В: нейтральні молекули; Г: катіон-радикали.</p>
	<p><u>Електронні спектри не представляють в координатах:</u></p> <p>A: $D - \lambda$; Б: $D - \tilde{\nu}$; В: $\lg \alpha - \lambda$; Г: $\lg (I_0/I) - 1/\lambda$.</p>

Приклад тестового задания для проверки знаний

1. Возбуждение – это электронный переход между:

- a) состояниями S_0 и S_1
- b) состояниями S_0 и T_1
- c) состоянием S_0 и любым состоянием S с более высокой энергией

2. В возбужденном состоянии Франка-Кондона молекула имеет:

- a) геометрию и электронную структуру, характерную для возбужденного состояния
- b) геометрию основного состояния и электронную структуру возбужденного состояния
- c) геометрию возбужденного состояния и электронную структуру основного состояния

3. Какой тип внутренней конверсии может быть излучающим?

- a) $S_4 \longrightarrow S_3$
- b) $S_1 \longrightarrow S_0$
- c) $T_2 \longrightarrow T_1$

4. Какой тип интеркомбинационной конверсии может быть излучающим?

- a) $T_1 \longrightarrow S_0$
- b) $T_1 \longrightarrow T_0$
- c) $S_1 \longrightarrow T_0$

5. Какое возбужденное состояние органических молекул имеет наибольшее время жизни?

a) S_1

b) T_1

c) любое

6. Какой вид люминесценции характерен для последовательности процессов в возбужденном состоянии: $S_0 \rightarrow S_2, S_2 \rightarrow T_4, T_4 \rightarrow T_1, T_1 \rightarrow S_1, S_1 \rightarrow S_0$

a) флуоресценция

b) фосфоресценция

c) электролюминесценция

7. Спектр возбуждения это зависимость:

- а) количества излученных фотонов от энергии этих излученных фотонов
- б) количества излученных фотонов от энергии поглощенных фотонов
- в) количества поглощенных фотонов от энергии этих поглощенных фотонов

8. Если спектры возбуждения, полученные для разных полос испускания, являются одинаковыми, это означает, что:

- а) в растворе два флуоресцирующих вещества;
- б) в растворе идет фотохимическая реакция;
- в) в растворе одно флуоресцирующее соединение, дающее две полосы испускания

9. Полоса фосфоресценции подчиняется правилу зеркальной симметрии относительно:

- а) длинноволновой полосы поглощения
- б) длинноволновой полосы испускания
- в) не подчиняется правилу зеркальной симметрии

10. Какая форма является источником свечения при хемилюминесценции?

- а) это флуоресценция одного из реагентов
- б) генерация фотонов – один из промежуточных процессов при протекании хемилюминесцентной реакции
- в) это испускание одного из возбужденных продуктов реакции

11. Один фотон может:

- а) возбудить только одну молекулу

- b) одновременно несколько молекул
- c) последовательно несколько молекул путем передачи энергии между ними

12. Ферстеровский перенос энергии?

- a) безызлучательный резонансный перенос энергии возбуждения между молекулами.
- b) излучательный перенос энергии возбуждения между молекулами.
- c) передача энергии как излучательным, так и безызлучательным путями

Количество баллов

из 24

Приклад екзаменаційного завдання

№1

1. Спектральні прилади і устаткування. Призначення, фізичний принцип роботи і особливості застосування спектральних приладів, їх функціональні можливості. Оптичні схеми сучасних фотокolorиметрів, спектрофотометрів, спектрофлуориметрів, ІЧ спектрометрів тощо. 5 балів

2. Класифікація люмінесцентних явищ (за типом збудження, за механізмом збудження). Термолюмінесценція, триболюмінесценція, радіолюмінесценція, електролюмінесценція, хемілюмінесценція, електрохемілюмінесценція та ін. 5 балів

3. Охарактеризувати вигляд спектрів флуоресценції та фосфоресценції. 5 балів

4. Хімічний зсув та його вимірювання. Константи спин-спінової взаємодії. Класифікація спектрів ПМР. Залежність спектрів ПМР від умов реєстрації. 5 балів

Загальні рекомендації з аналізу спектрів ПМР під час структурного аналізу.

5. Використання електронної спектроскопії в аналізі біологічних матеріалів, харчових продуктів та фармпрепаратів. 5 балів

6. Встановлення будови органічної речовини за даними УФ-, ІЧ-, ПМР- та мас-спектрів. Приклад № 1 5 балів

7. Пояснити, яка форма є джерелом світіння при хемілюмінесценції?

- а) це флуоресценція одного з реагентів;
- б) генерація фотонів - один з проміжних процесів при протіканні хемілюмінесцентної реакції;
- в) це випромінювання одного із збуджених продуктів реакції.

5 балів

8. Охарактеризувати спектри збудження. Вибрати правильне твердження: спектр збудження це залежність:

- а) кількості фотонів, що випромінюють, від енергії цих фотонів, що випромінюють;
- б) кількості фотонів, що випромінюють, від енергії поглинених фотонів;
- с) кількості поглинених фотонів від енергії цих поглинених фотонів.

5 балів