НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
Інститут фізики НАН України

З А Т В Е Р Д Ж У Ю
Директором Інституту фізики НАН України, член-кор. НАНУ, д.ф.-м.н.
_____ **М.В. Бондар**
(підпис)
« 27 » жовтня 2023 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ВК.13
Коливальна спектроскопія біологічних молекул

для аспірантів

спеціальності: 104 Фізика і астрономія

третього (освітньо-наукового) рівня
вищої освіти – доктор філософії

Київ - 2023

Розробник:

С.н.с, зав. відділу, завідувач лабораторії Підсиленою поверхнею коливальної спектроскопії Інституту фізики НАНУ, канд. фіз.-мат. наук. _____/О.М. Фесенко/

Робочу програму узгоджено науково-методичною радою

Протокол № 10-1 від 24 жовтня 2023 р.

Головою науково-методичної ради _____/М.В. Бондар/

Робочу програму затверджено Вченою радою Інституті фізики НАНУ

Протокол № 10 від 26 жовтня 2023 р.

Голова Вченої ради _____/М.В. Бондар/

Робочу програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія» 27 жовтня 2023р.

Гарант освітньої програми _____/М.В. Бондар/

Пролонговано Вченою радою Інституту фізики НАН України:

навчальні роки пролонгації	Голова Вченої ради ІФ НАН України	підпис	№ протоколу	дата протоколу
2024**/20**25	М.В. Бондар		5	27.06.2024
20_____/20_____				
20_____/20_____				
20_____/20_____				

.

1. Загальні відомості

Найменнування показників	Характеристика дисципліни за денною формою навчання
Вид дисципліни	**вибіркова**
Мова викладання, навчання та оцінювання	**українська**
Загальний обсяг кредитів / годин	**4/120**
Курс	**2**
Семестр	**2**
Кількість змістових модулів з розподілом	**1**
Обсяг кредитів	**4**
Обсяг годин, В тому числі:	**120**
Лекції	**30**
Практичні заняття	**15**
Самостійна робота	**75**
Форма підсумкового контрою	**екзамен**

2. Мета, завдання та очікувані результати навчальної дисципліни

Робоча програма навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул» є нормативним документом, який розроблений на основі освітньо-наукової програми, далі ОП, (затверджена Вченою радою Інституту фізики НАН України, протоколом № 10 від 26 жовтня 2023 року) підготовки здобувача третього рівня відповідно до навчального плану спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Передумова вивчення. Навчальний курс ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул» є складовою циклу професійної підготовки фахівців третього освітньо-кваліфікаційного рівня "доктор філософії". Програма курсу орієнтована на аспірантів, які вже знайомі з загальним курсом фізики оптики, твердого тіла, молекулярної фізики, термодинаміки та математичною фізикою.

Мета навчальної дисципліни. ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»: детальне ознайомлення з основними поняттями, законами, принципами та методами сучасної молекулярної спектроскопії.

Зміст навчальної дисципліни. Теоретичні та практичні знання, набуті при вивченні дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул», ґрунтуються на знаннях, отриманих при вивченні фундаментальних дисциплін – математичного аналізу, аналітичної геометрії, вищої алгебри, методів математичної фізики, теорії ймовірностей, механіки, молекулярної фізики, електрики і магнетизму, оптики, атомної фізики, електродинаміки, термодинаміки і статистичної фізики, лазерної фізики, квантової механіки, хімії, а також теорії коливань і хвиль, загальної біофізики, фізики макромолекул, квантової хімії, молекулярної біології, фізики біополімерів.

Предметом навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул» є вибрані розділи сучасної теоретичної та експериментальної оптики та лазерної фізики. Особлива увага приділена взаємодії випромінювання з речовиною, вивченню властивостей електронних, коливальних та обертальних спектрів молекул, аналізу спектрів комбінаційного розсіювання світла та ІЧ поглинання для різних типів біологічних молекул.

Основними завданнями навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул» є вивчення та засвоєння аспірантами студентами основних теоретичних положень методів ІЧ- та Раман спектроскопії, одержання практичних навичок з інтерпретації відповідних спектрів і їх використання для встановлення складу і будови хімічних сполук та біологічних молекулярних комплексів.

Фахові програмні результати навчання (вимоги до знань та вмінь)

В результаті вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен

Знати: основні властивості с взаємодія випромінювання з речовиною; параметри, що характеризують енергетичні спектри. Елементи практичної спектроскопії.та області практичних застосувань набутих знань.

Вміти: застосувати набуті знання в науково-дослідних та навчальних установах.

Завданням навчальної дисципліни (відповідно до переліку ОП) ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул» набути компетентносте:

Загальні: ЗК1,ЗК2, ЗК3.

Спеціальні: СК1, СК2, СК5, СК6

Програмні результати навчання: РН1, РН4, РН5, РН6, РН7, РН8, РН9.

3. Тематичний план

(структура залікового кредиту)
з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»
(2 курс – 2 семестр)

№	Зміст	Лекції, год.	Практичні, год.	Самостійна робота, год.	Разом, год.
1	**Лекція 1. Тема1,2.** Енергетичні рівні: основний і збуджені. Дисперсія електромагнітних хвиль.	3	0	7	10
2	**Лекція 2. Тема3,4.** Рівноважне випромінювання. Коефіцієнт поглинання. Коефіцієнт екстинкції.	3	0	7	10
3	**Лекція 3. Тема 5,6.** Принципи побудови оптичних спектрометрів. Основні методи вимірювання.	3	3	8	14
4	**Лекція 4. Тема 7, 8.** Правила відбору і теорія симетрії. Параметри, що визначають інтенсивність електронного переходу.	3	0	7	10
5	**Лекція 5. Тема 9,10.** Енергетичні рівні іона в електричному полі октаедричної симетрії. Розщеплення енергетичних рівнів у кристалічних полях.	3	0	7	10
6	**Лекція 6. Тема 11, 12.** Природа забарвлення комплексних з'єднань. Коливальна спектроскопія.	3	4	8	15
7	**Лекція 7. Тема 13,14,15**. Комбінаційне розсіювання світла. Ідентифікація активних коливань для молекулярних структур з симетрією, що різниться. Підсилене поверхнею комбінаційне розсіяння світла (SERS ефект) та її застосування.	3	0	8	11
8	**Лекції 8. Тема 16,17.** Основні принци та можливості Фур'є-спектроскопії та її переваги порівняно з традиційною спектроскопією. Експериментальні геометрії вимірювання: пропускання, відбивання, порушеного	3	4	8	15

	внутрішнього відбивання (ATR).				
9	**Лекції 9, Тема 18,19.** Аналіз спектру та віднесення молекулярних коливань. Особливості характеристичних частот і "відбитків пальців". Принципи кількісного аналізу сумішей за спектральними даними.	3	4	8	15
10	**Лекції 10, Тема 20** Підсилене поверхнею інфрачервоне поглинання біологічними молекулами. (SEIRA ефект) та її застосування.	3	0	7	10
Всього		**30**	**15**	**75**	**120**

Методичне забезпечення навчальної дисципліни забезпечують:
опорні конспекти лекцій, бібліотечні посібники зі списку рекомендованої літератури, електронні посібники, мультимедійні презентації, діючі нормативно-правові законодавчі акти України, довідково-інформаційні інтернет-джерела тощо.

4. Зміст навчальної дисципліни

ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

Тема 1. Енергетичні рівні: основний і збуджені. Розщеплення енергетичних рівнів. Спонтанні і вимушені переходи між ними. Правила відбору у молекулярній спектроскопії. (1,5 години)
Тема 2. Дисперсія електромагнітних хвиль. Модель гармонійного осцилятора. Силова стала. Коливальна енергія молекул. Коливальне квантове число. Потенціальна енергія ангармонійного осцилятора. Коефіцієнт ангармонійності. Енергетичні терми, криві потенціальної енергії та квантове правило відбору для гармонійного та ангармонійного осцилятора. (1,5 години)
Тема 3. Рівноважне випромінювання. Фундаментальна частота (основний тон) і обертони (надтони). Нерівноважне випромінювання. Люмінесценція. (1,5 години)
Тема 4. Коефіцієнт поглинання. Коефіцієнт екстинкції. Сила осцилятора. Нормальні коливання. (1,5 години)
Тема 5. Принципи побудови оптичних спектрометрів. Джерела випромінювання. Диспергуючі системи. Приймачі випромінювання. (1,5 години)
Тема 6. Контур спектральної лінії. Основні методи розділення спектральних смуг, що перекриваються. Основні способи підвищення відношення сигнал/шум. (1,5 години)
Тема 7. Правила відбору і теорія симетрії. (1,5 години)
Тема 8. Параметри, що визначають інтенсивність електронного переходу. 1,5 години)
Тема 9. Енергетичні рівні іона в електричному полі октаедричної симетрії. (1,5 години)
Тема 10. Розщеплення енергетичних рівнів у кристалічних полях. (1,5 години)
Тема 11. Природа забарвлення комплексних з'єднань. Частоти, силові сталі і амплітуди відхилень в наближенні гармонійного і ангармонійного осцилятора для двохатомної молекули. (1,5 години)
Тема 12. Коливальні спектри. Силова стала. Принцип Франка-Кондона. Нормальні коливання. Резонанс Фермі. (1,5 години)
Тема 13. Комбінаційне розсіювання світла. (1 година)
Тема 14. Ідентифікація активних коливань для молекулярних структур з симетрією, що різниться. Обертальні спектри. (1 година)
Тема 15. Підсилене поверхнею комбінаційне розсіяння світла (SERS ефект) та її застосування. (1 година)

Тема 16. Основні принци та можливості Фур'є-спектроскопії та її переваги порівняно з традиційною спектроскопією. (1,5 години)
Тема 17. Експериментальні геометрії вимірювання: пропускання, відбивання, порушеного внутрішнього відбивання (ATR). (1,5 години)
Тема 18. Аналіз спектру та віднесення молекулярних коливань. Особливості характеристичних частот і "відбитків пальців". Кореляційні таблиці, банки даних. Особливості застосування концепції групових частот. (1,5 години)
Тема 19. Принципи кількісного аналізу сумішей за спектральними даними. Ідентифікація функціональних груп, компонентів сумішей. (1,5 години)
Тема 20. Підсилене поверхнею інфрачервоне поглинання біологічними молекулами. (SEIRA ефект) та її застосування. (3 години)
Практичне заняття № 1 – методи підготовки зразків, практичні навички роботи обробки ІЧ Фур'є спектрів. (3 години)
Практичне заняття № 2 – методи підготовки зразків, практичні навички роботи обробки Раман-спектрів. (4 години)
Практичне заняття № 3 Визначення напівширини, частоти та віднесення коливань (4 години)
Практичне заняття № 4 Розклад ІЧ та Раман смуг на компоненти (4 години)

5. Практичні заняття

з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

Практичне закріплення лекційного матеріалу та наукові доповіді аспіранта пов'язані з темами лекцій і є частиною змісту дисципліни.

6. Самостійна робота

з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

№	Зміст самостійної роботи аспірантів	Обсяг, годин
1.	Вивчення матеріалу лекції	30
2.	Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення	45
Усього за навчальну дисципліну		75

7. Методи викладання

з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

У процесі викладання дисципліни використовуються такі методи:
1) методи організації та здійснення навчально-пізнавальної діяльності (бесіда, лекція; ілюстрація; лабораторні роботи, реферати; самостійна робота студентів);
2) методи стимулювання й мотивації навчально-пізнавальної діяльності (навчальні дискусії, модульно-рейтингова система знань);
3) методи контролю (самоконтролю, взаємоконтролю), корекції (самокорекції, взаємокорекції) за ефективністю навчально-пізнавальної діяльності.

8. Рейтингова система оцінювання

з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

Основними формами організації контролю у процесі вивчення студентами даної дисципліни є індивідуальна, групова та фронтальна перевірка знань, вмінь та навичок студентів (усна та письмова). Рейтинг аспіранта складається з наступних отриманих балів:

1. Експрес-контроль – 20 балів. (усне опитування чи самостійні роботи під час навчального процесу)
2. Практичні заняття та самостійна робота – 40 балів.
3. Екзамен – 40 балів.

Заохочувальні та штрафні бали

1. При відсутності на лекції/практичному занятті без поважних причин -2 бали
2. Подана в журнал стаття чи виступ на конференції за темою курсу +10 балів.

Сума як штрафних так і заохочуваних балів розраховується за формулою 0,1R, де R – загальна кількість балів, і не має перевищувати в цілому 10 балів.

Шкала рейтингів.

Загальна кількість балів, яку аспіранта може отримати під час вивчення курсу складається із суми вагових балів отриманих протягом вивчення дисципліни

R=20+40+40=100 (балів)

Шкала відповідності оцінок

Рейтингова оцінка	Значення оцінки	Рейтинг у відсотках, %
A	**Відмінно** – відмінний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з, можливими незнасними недоліками.	90-100
B	**Дуже добре** – достатньо високий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу без суттєвих (грубих) помилок.	82-89
C	**Добре –** добрий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з незначною кількість помилок.	75-81
D	**Задовільно –** посередні рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу із значною кількістю недоліків, достатній для подальшого навчання або ж професійної діяльності.	69-74
E	**Достатньо -** мінімально можливий допустимий рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу.	60-68
FX	Незадовільно з можливістю повторного складання – незадовільний рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу з можливістю повторного перескладання після самостійного доопрацювання.	35-59
F	Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням курсу – низький рівень знань (умінь) в межах обов'язкового матеріалу, що вимагає повторного вивчення матеріалів курсу.	1-34

9. Орієнтовний перелік екзаменаційних питань

з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

1. На чому заснований метод ІЧ-спектроскопії?
2. Що таке ІЧ спектр?
3. В якому діапазоні довжин хвиль лежить ІЧ область спектра.
4. Що таке область "відбитку пальців" поглинання?
5. Які коливання в ІЧ-спектрах називають активними?
6. На які три основні області поділяють ІЧ-спектр?
7. Чим обумовлені смуги поглинання в ІЧ-області?
8. Що таке валентне і деформаційне коливання?
9. Які типи валентних коливань Ви знаєте?
10. Які типи деформаційних коливання Ви знаєте?
11. Як впливає маса атомів і енергія зв'язку на частоту валентних коливань.
12. Що необхідно враховувати при розшифровці спектрів.
13. Які прилади використовують у ІЧ-спектроскопії?
14. Перерахуйте основні частини робочої установки - ІЧ Фур'є спектрометра
15. Де застосовують ІЧ-спектроскопію?

16. Які переваги ІЧ-спектроскопії?
17. Перерахуйте основні частини робочої установки - Раман – спектрометра
18. У чому різниця між ІЧ та Раман спектроскопією?
19. Напишіть правила відбору для ІЧ спектроскопії.
20. Напишіть правила відбору для Раман спектроскопії.
21. Як залежать спектри від агрегатного стану.
22. Що таке поляриметрія? Що аналізують поляриметричними методами?
24. Що таке поляризація світла?
25. Що таке оптична активність?
26. Що є об'єктом спектрофотометричних вимірювань?
27. На чому заснований спектрофотометричний метод?
28. Який закон використовують для визначення концентрації розчинів?

10.Рекомендована література:

з навчальної дисципліни ВК.13 «Коливальна спектроскопія біологічних молекул»

Основна:

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. — Санкт-Петербург, Либроком, 2009. - 416 с.
2. Ландсберг Г. С. Оптика. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. — 848 с.
3. Пентин Ю.А. , Курамшина Г. М., Основы молекулярной спектроскопии. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с.
4. Чижик В. И. Ядерная магнитная релаксация. — СПб.: Изд. С-Петерб. ун-та, 2004. — 388 с.
5. Емец Б.Г. , Ромоданова Э.А. , Тиманюк В.А. Спектроскопические методы в биофизике, биологии и медицине. – Харьков: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2011. – 116 с.

Допоміжна

6. Артамонов В.А., Словохотов Ю.Л. . Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии. - М.: 2005. - 512 с.
7. Пентин Ю.А., Вилков Л.Ф. Физические методы исследования в химии. М.: Высшая школа, 2003. – 321 с.
8. Нифантьев И.Э. , Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса.– М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2006. - 198 с.
1. 5. B. D. Josephson, Possible new effects in superconductive tunnelling, Phys. Lett., 1, 251 (1962).
2. 6. R. C. Jaklevic, John Lambe, A. H. Silver, and J. E. Mercer eau, Quantum interference effects in Josephson tunneling, Phys. Rev. Lett. 12, 159 (1964).
3. 7. C. Hilbert and J. Clarke, DC SQUIDs as radiofrequency amplifiers, J. Low Temp. Phys., 61, 263 (1985).
4. 8. J. M. Martinis, S. Nam, J. Aumentado, and K. M. Lang, and C. Urbina, Decoherence of a superconducting qubit due to bias noise, Phys. Rev. B67, 094510 (2003).
5. 9. G. P. Berman, A. A. Chumak, and V. I. Tsifrinovich, Dynamics of a Phase Qubit-Resonator System: Requirements for Fast Nondemolition Readout of a Phase Qubit, J. Low Temp. Phys., 170, pp. 172-184 (2013).
6. 10. M. Boissonneault, J. M. Gambetta, and A. Blais, Dispersive regime of circuit QED: Photon-dependent qubit dephasing and relaxation rates, Phys. Rev. A 79, 013819 (2009).
7. G. P. Berman, A. A. Chumak, Influence of External Fields and Environment on the Dynamics of Phase-Qubit-Resonator System, Phys. Rev. A 83, 042322
8. I.S.V. Yepes, M.R.R. Gesualdi, Dynamic digital holography for recording and reconstruction of 3D images using optoelectronic devices, J. Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Appl., (2017), Vol. 16, № 3, P. 801-815.