

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР ім. Б. І. ВЕРКІНА
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.О. Директора
ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна
НАН України

М. І. Стущук

« 7 » 07 2020 р.



СИЛАБУС

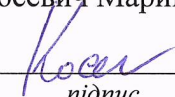
навчальної дисципліни

Молекулярна фізика: актуальні проблеми та нові підходи
(назва навчальної дисципліни)

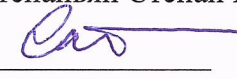
з галузі знань «10 Природничі науки»
за спеціальністю «104 Фізика та астрономія»

РОЗРОБНИК/-И:

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник
відділу молекулярної біофізики ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України Косевич Марина Вадимівна


підпис

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник
відділу молекулярної біофізики ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України Степаньян Степан Григорович


підпис

Погоджено Науковою радою з проблеми «Молекулярна біофізика» ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН
України 25.06 2020 р., протокол № 133

Голова Ради  / В. О. Карачевцев /

Вчений секретар Ради  / О. Ю. Іванов /

Затверджено Вченою радою Фізико-технічного інституту низьких температур
ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України, 07.07. 2020 р., протокол № 5.

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР ім. Б.І. ВЕРКІНА
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

МОЛЕКУЛЯРНА ФІЗИКА: АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ТА НОВІ ПІДХОДИ

2020-2021 навчальний рік

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
Назва	МОЛЕКУЛЯРНА ФІЗИКА: АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ТА НОВІ ПІДХОДИ
Адреса викладання	м. Харків, 61103. пр. Науки, 47, Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України
Рівень вищої освіти	Третій освітньо-науковий рівень
Галузі знань	10 «Природничі науки»
Шифр та назва спеціальності	104 Фізика та астрономія
Викладач /-чі/	д.ф.-м.н., с.н.с. Косевич М.В. д.ф.-м.н., с.н.с. Степаньян С.Г.
Контактна інформація викладача (-ів)	mvkosevich@ilt.kharkov.ua stepanian@ilt.kharkov.ua
Графік занять	За розкладом
Консультації по курсу відбуваються	П'ятниця 16.00-17.00. пр. Науки, 47, теор. корпус, к. 601; он-лайн консультації через Skype або Wiber (для узгодження часу писати на електронну пошту mvkosevich@ilt.kharkov.ua , stepanian@ilt.kharkov.ua)
Сторінка курсу	https://ilt.kharkov.ua

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
Інформація про навчальну дисципліну	Дисципліна «Молекулярна фізика: актуальні проблеми та нові підходи» є нормативною навчальною дисципліною, яка входить до циклу загальної підготовки за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» на третьому /освітньо-науковому/ рівні підготовки доктора філософії з фізики. Дана дисципліна викладається у 3-4 семестрах підготовки в обсязі 4 кредитів за Європейською кредитно-трансферною системою /ECTS/.
Анотація	Курс «Молекулярна фізика: актуальні проблеми та нові підходи» є курсом зі спеціалізації, який узагальнює та систематизує знання аспірантів, отримані у інших курсах, з точки зору дослідження природних явищ на молекулярному рівні, а також знайомить їх з новими експериментальними та розрахунковими методами молекулярно-фізичних досліджень та останніми видатними досягненнями у цій галузі.
Мета та цілі	Мета вивчення дисципліни: формування у майбутнього науковця уявлень щодо молекулярної будови речовини та фізичних процесів на молекулярному рівні, зокрема, на рівні окремих молекул. З цією метою ознайомити аспірантів з сучасними актуальними напрямками фундаментальних досліджень в області молекулярної фізики, молекулярної біофізики, нанофізики та нанобіофізики, а також з сучасними методами дослідження структури, маси, енергії та інших характеристик ізольованих молекул і їх міжмолекулярних взаємодій. Проілюструвати успішне вирішення таких задач на прикладах досліджень останніх років за кордоном, в Україні та ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, зокрема експериментальними методами мас-спектрометрії, ІЧ спектроскопії з матричною ізоляцією та теоретичними методами комп'ютерного моделювання. Освітньою ціллю курсу є формування вміння у аспірантів самостійно вибирати і обґрунтовувати свій вибір щодо оптимального методу дослідження властивостей конкретного об'єкта заданої природи у процесі виконання дисертаційних робіт. В результаті вивчення даного курсу аспірант повинен знати основні фундаментальні поняття предмету та використовувати вивчені експериментальні та розрахункові методи досліджень при самостійному виконанні конкретних науково-дослідницьких робіт.
Загальний обсяг у кредитах Європейської кредитно-трансферної системи /ECTS/	4 кредити
Загальна кількість годин	120 годин
Структура	36 години аудиторних: з них 30 годин лекцій, 6 годин семінарських занять,

Назва п/п	Коротка інформація
	84 години самостійної роботи.
Очікувані результати навчання	<p>У результаті вивчення курсу аспірант повинен знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - термінологію в галузі молекулярної фізики і біофізики; - особливості фізичних явищ, процесів та взаємодій на молекулярному рівні; - фізичні основи сучасних методів молекулярно-фізичних досліджень, зокрема на рівні окремих молекул та біополімерів; - термінологію в галузі квантово-механічних обчислень та комп'ютерного моделювання. <p>Інтегральний результат навчання полягає у тому, що аспірант повинен вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - застосовувати фундаментальні знання з молекулярної фізики для аналізу явищ та процесів, які відбуваються в твердих тілах та рідинах на молекулярному рівні; - обґрунтовано вирішувати фізичні задачі в рамках своєї спеціальності, використовуючи різнобічні міждисциплінарні знання з молекулярної фізики і біофізики; - використовувати довідкову і навчальну літературу в галузі молекулярної фізики і біофізики, знаходити інші необхідні джерела інформації і працювати з ними; - використовувати вивчені експериментальні та розрахункові методи у самостійній науковій роботі; - дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та діяти відповідно норм академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень та у науково-педагогічній діяльності; - працювати над власним розвитком та вдосконалюванням, виявляти прагнення до підвищення професійної кваліфікації та критично оцінювати власні здобутки, бачити обмеження та вміти визначати перспективи подальшого професійного вдосконалення.
Ключові слова	Молекулярна фізика, молекулярна біофізика, нанобіофізика, міжмолекулярні взаємодії, мас-спектрометрія, низькотемпературні спектроскопічні методи, спектроскопічні методи з матричною ізоляцією, структура молекул, комп'ютерне моделювання, квантово-механічні розрахунки, молекулярна динаміка.
Програма навчальної дисципліни	<p>Тема 1. Основні поняття молекулярної фізики та фізики біомакромолекул</p> <p>Тема 2. Маса атомів та молекул. Ізотопи.</p> <p>Тема 3. Основи методу мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометричної установки.</p> <p>Тема 4. Методи іонізації/десорбції неорганічних, органічних, біологічних молекул.</p> <p>Тема 5. Визначення молекулярно-фізичних параметрів речовини за допомогою мас-спектрометрії</p>

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>Тема 6. Фізика кластерів. Нанотехнології. Низькотемпературна мас-спектрометрія.</p> <p>Тема 7. Застосування методу мас-спектрометрії в молекулярній біофізиці та біомедицині.</p> <p>Тема 8. Науково-організаційне супроводження наукових досліджень.</p> <p>Тема 9. Спектральні методи дослідження структури молекул.</p> <p>Тема 10. Сучасні методи дослідження структури молекул в ізольованому стані.</p> <p>Тема 11. Низькотемпературна спектроскопія молекул у матрицях інертних газів.</p> <p>Тема 12. Конформаційна структура молекул.</p> <p>Тема 13. Вплив УФ та ІЧ опромінення на структуру молекул.</p> <p>Тема 14. Сучасні методи квантово-механічних розрахунків.</p> <p>Тема 15. Методи комп'ютерного моделювання структури та спектрів молекул.</p>
<p>Короткий опис змісту тем</p>	<p>Тема 1. Основні поняття молекулярної фізики та фізики біомакромолекул.</p> <p>Атомістична теорія будови речовини. Атомно-молекулярні будова речовини; агрегатні стани речовини, термодинамічні параметри фазових переходів. Міжмолекулярні взаємодії – структурні та енергетичні характеристики. Відмінні риси фізики біополімерів та біомакромолекул. Експериментальні та теоретичні методи молекулярно-фізичних досліджень.</p> <p>Тема 2. Маса атомів та молекул. Ізотопи.</p> <p>Ключові поняття; маса, одиниці вимірювання маси атомів та молекул. Номінальна, середня, моно ізотопна маси молекул. Методи вимірювання маси атомів та молекул. Будова атома, дефект маси. Ізотопи, ізотопні співвідношення, ізотопний аналіз. Ізотопна мас-спектрометрія - від ядерно-фізичних досліджень до біомедичних та екологічних застосувань. Інформація про хімічні елементи, що міститься у таблиці Менделєєва. Ізотопи водню та гелію.</p> <p>Тема 3. Основи методу мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометричної установки.</p> <p>Основи методу мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометричної установки. Методи розділення молекул за співвідношенням їх маси до заряду. Види мас-аналізаторів, вади та переваги, сфери застосування. Фізичні принципи, історія розробки. Ідеальний мас-аналізатор – факт чи фікція? Історія успіху – створення мас-аналізатора «Орбітреп».</p> <p>Тандемна мас-спектрометрія (МСп). Гігантські та мініатюрні мас-аналізатори. Історія наукового приладобудування в Україні: інженерні розробки ФТІНТ НАН України, історія виробничого об'єднання «Електрон»/«SELMІ» (Суми). Система отримання вакууму. Електронні керуючі блоки. Поєднання мас-спектрометра з керуючим комп'ютером. Детектори іонів. Система реєстрації та обробки даних.</p>

<i>Назва n/n</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>Огляд сучасних лабораторних та комерційних приладів, аналіз ринку фірм-виробників мас-спектрометричного обладнання.</p> <p>Тема 4. Методи іонізації/десорбції неорганічних, органічних, біологічних молекул.</p> <p>Методи іонізації/десорбції атомів та молекул як приклад розвитку наукової думки – історія створення, класифікація, фізичні принципи. Джерела іонів: конструктивні схеми, принципи роботи. Подолання принципових проблем у дослідженні біомакромолекул та біополімерів. Сучасні науковці, які вирішували проблему переведення біомолекул до газової фази; внесок українських науковців з Києва, Харкова, Сум. Внесок науковців Харківського національного університету у розвиток вторинно-емісійної мас-спектрометрії та ФТІНТ НАНУ у розвиток польової іонізації та польової десорбції, низькотемпературної мас-спектрометрії.</p> <p>Нобелівські премії в області мас-спектрометрії. Внесок мас-спектрометрії у вирішення низки фундаментальних проблем фізики та хімії.</p> <p>Тема 5. Визначення молекулярно-фізичних параметрів речовини за допомогою мас-спектрометрії</p> <p>Методи аналізу експериментальних даних. Одиниці представлення маси молекул. Одиниці вимірювання інтенсивності іонного струму. Базові прийоми обробки оригінальних мас-спектрів. Калібрування шкали мас. Поняття чутливості та роздільної здатності приладу. Мас-спектрометрія ультра-високих мас та високої роздільної здатності. Використання тандемної мас-спектрометрії для встановлення структури органічних та біомолекул. Прийоми дисоціації, індукованої зіткненнями. Секвкнення полімерів та біополімерів. Методики визначення термодинамічних параметрів міжмолекулярних взаємодій. Електронні параметри атомів та молекул: енергія (потенціал) іонізації, спорідненість до електрона.</p> <p>Тема 6. Фізика кластерів. Нанотехнології. Низькотемпературна мас-спектрометрія.</p> <p>Фізика кластерів. Фізичні, хімічні, біологічні кластери, нанокластери: структурна організація, термодинамічні параметри. Супрамолекулярна хімія. Самозбірка та самоорганізація молекулярних структур. Мас-спектрометрія в нанотехнології і нанотехнологія для мас-спектрометрії. Міждисциплінарні задачі фізики і хімії поверхні, матеріалознавства, які вирішуються за допомогою мас-спектрометрії.</p> <p>Низькотемпературна мас-спектрометрія. Низькотемпературна мас-спектрометрія: фізичні принципи та приборне втілення. Застосування до фізики води та льоду.</p> <p>Тема 7. Застосування методу мас-спектрометрії в молекулярній біофізиці та біомедицині</p> <p>Невалентні міжмолекулярні взаємодії органічних та біологічних молекул. Визначення термодинамічних параметрів</p>

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>міжмолекулярних взаємодій біомолекул. Рівняння Арреніуса. Кореляції між біофізичними спектроскопічними дослідженнями плавлення ДНК та мас-спектрометричними експериментами методом електророзпилення для моделювання цього процесу. Внесок науковців ФТІНТ НАН України: розробка методу температурно-залежної польової мас-спектрометрії для вимірювання термодинамічних параметрів невалентних міжмолекулярних взаємодій азотних основ, азотних основ з водою (гідратація), амінокислотами (білково-нуклеїнове розпізнавання), протипухлинними препаратами (молекулярні механізми хіміотерапії). Фундаментальне питання стабільності біомолекул в газовій фазі. Отримання інформації стосовно структури і конформацій біополімерів. Застосуванні низькотемпературної мас-спектрометрії у кріохімії, кріобіології, кріобіофізиці.</p> <p>Іміджинг (Imaging) - візуалізація-мапування на молекулярному рівні: неорганічні, органічні, біологічні об'єкти. Новітні винаходи останніх років для біомедичних застосувань. Різноманітні області застосування молекулярно-фізичного мас-спектрометричного аналізу: геохронологія, космічні дослідження, криміналістика, екологічний контроль, мистецтвознавство, тощо.</p> <p>Тема 8. Науково-організаційне супроводження наукових досліджень.</p> <p>Науково-організаційні питання: мас-спектрометричні товариства, конференції. Бібліографія, спеціалізовані журнали. Методика літературного пошуку, користування інтернет-ресурсами. Комп'ютеризовані бази даних, спектрів, програм для обробки первинних даних. Обробка великих масивів даних, застосування новітніх комп'ютерних та інформаційних технологій. Огляд провідних лабораторій, перспективних напрямків досліджень.</p> <p>Тема 9. Спектральні методи дослідження структури молекул.</p> <p>Інфрачервона спектроскопія. Головні характеристики ІЧ-випромінювання. Види та енергія коливань молекул. Характеристичні коливання. Поглинання випромінювання. Ультрафіолетова спектроскопія. Раман-спектроскопія. Джерела збуджуючого світла.</p> <p>Тема 10. Сучасні методи дослідження структури молекул в ізольованому стані.</p> <p>Спектроскопія молекул у газовій фазі. Спектроскопія в надзвукових газових струменях і в кластерах гелію. Метод матричної ізоляції. Історія методу та його характерні особливості. Дослідження структури матрично-ізольованих біомолекул.</p>

Назва п/п	Коротка інформація
	<p>Тема 11. Низькотемпературна спектроскопія молекул у матрицях інертних газів.</p> <p>Сучасні установки для матричної ізоляції. Системи наплення матриць і контроль концентрації. Реєстрація і обробка спектрів. Матричні ефекти. Температурний відпал матриць.</p> <p>Тема 12. Конформаційна структура молекул.</p> <p>Особливості дослідження структури конформаційно-лабільних молекул. Застосування методу матричної ізоляції для дослідження міжмолекулярних комплексів. Контрольовані зміни структури матрично-ізольованих молекул. Конформаційне охолодження молекул.</p> <p>Тема 13. Вплив УФ та ІЧ опромінення на структуру молекул.</p> <p>Таутомерні та конформаційні переходи в молекулах при УФ-опроміненні. Механізми переходів. ІЧ-опромінювання у дальній інфрачервоній області спектру. Фіксація термодинамічно нестабільних конфігурацій молекул у матрицях.</p> <p>Тема 14. Сучасні методи квантово-механічних розрахунків.</p> <p>Наближення Борна-Оппенгеймера. Одноелектронне наближення. Наближення МО ЛКАО. Будова атома. Утворення хімічного зв'язку і будова молекул і твердих тіл. Теорія молекулярних орбіталей. Теорія функціонала густини. Взаємодія окремих молекул, енергетичні бар'єри на шляху трансформацій молекул.</p> <p>Тема 15. Методи комп'ютерного моделювання структури та спектрів молекул.</p> <p>Особливості комп'ютерного моделювання матрично-ізольованих молекул. Метод молекулярної динаміки. Силкові поля. Моделювання процесів наплення матриць. Квантово-механічні методи розрахунків матричних кластерів. Врахування впливу матриці на спектри ізольованих молекул. Матричні зсуви і матричне розщеплення спектральних смуг.</p>
Теми лекційних занять	<ul style="list-style-type: none"> - Основні поняття молекулярної фізики та фізики біомакромолекул. - Маса атомів та молекул. Ізотопи. - Основи методу мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометричної установки.

Назва n/n	Коротка інформація
	<ul style="list-style-type: none"> - Методи іонізації/десорбції неорганічних, органічних, біологічних молекул. - Визначення молекулярно-фізичних параметрів речовини за допомогою мас-спектрометрії - Фізика кластерів. Нанотехнології. Низькотемпературна мас-спектрометрія. - Застосування методу мас-спектрометрії в молекулярній біофізиці та біомедицині. - Науково-організаційне супроводження наукових досліджень. - Спектральні методи дослідження структури молекул. - Дослідження структури молекул в ізольованому стані. - Основи методу низькотемпературної ІЧ-спектроскопії молекул. - Конформаційна структура молекул. - Вплив УФ та ІЧ опромінення на структуру молекул. - Сучасні методи квантово-механічних розрахунків. - Комп'ютерне моделювання структури та спектрів молекул.
Теми семінарських занять	<ul style="list-style-type: none"> - Демонстрація мас-спектрометричного обладнання. Основні закономірності формування мас-спектрів багатоатомних молекул: молекулярні, фрагментні та кластерні іони. Прийоми обробки оригінальних мас-спектрів з метою ідентифікації складу зразків, що досліджуються. Методики підготовки зразків для досліджень. Демонстраційні вимірювання. - Методи розрахунків ізотопних розподілів для неорганічних та органічних молекул (комп'ютерна програма IsoPro). Практичні завдання: обробка оригінальних мас-спектрів; розрахунок ізотопних співвідношень для молекул або іонів, до складу яких входять поліізотопні елементи. Перегляд Інтернет-ресурсів, які демонструють роботу сучасних приладів та дають практичні методичні рекомендації. - Знайомство з експериментальним обладнанням для дослідження ізольованих молекул. Методи та програмне забезпечення для обробки ІЧ-спектрів. Сучасне програмне забезпечення для розрахунків матричних кластерів. Програма NAMD для розрахунків методом молекулярної динаміки. Параметризація силових полів. Пакети програм для квантово-механічних розрахунків: Gaussian, GAMESS, ORCA. Підготовка вихідних даних і проведення тестових розрахунків.
Теми для самостійної роботи	<ul style="list-style-type: none"> - Систематизація відомостей про масу як фізичну величину, про масу атомів та молекул. Маса у класичній механіці: гравітаційна маса, інертна маса. Маса у релятивістській механіці: «маса спокою», «релятивістська маса». Одиниці вимірювання маси. - Термодинамічні параметри міжмолекулярних взаємодій: експериментальні та теоретичні методи встановлення. - Взаємодія іонізуючих факторів (електрони, прискорені іони та атоми, нанокластери, фотони, лазерні імпульси) з

<i>Назва n/n</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>речовиною. Застосування при розробці методів іонізації/десорбції речовини. Переріз зіткнень та іонізації. Довжина вільного пробігу.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Розрахунок ізотопних співвідношень для поліізотопних молекул, пошук та порівняння можливостей сучасних комп'ютерних програм. Відображення ізотопів елементів у таблиці Менделєєва. - Первинна інформація стосовно обробки та аналізу мас-спектрів органічних сполук та біомолекул. Методи інтерпретації мас-спектрів. - Аналіз будови різноманітних сучасних мас-спектрометричних приладів за матеріалами фірм-виробників експериментальної техніки. - Пошук та перегляд Інтернет-ресурсів з демонстрацією роботи сучасних мас-спектрометричних приладів, методів підготовки зразків, обробки даних. - Фізика кластерів. Фізичні, хімічні, ковалентні, не ковалентні кластери неорганічних і органічних сполук. Методи отримання та дослідження. - Аналіз коливальних спектрів багатоатомних молекул. Віднесення коливальних смуг і їх теоретична інтерпретація. - Застосування коливальної спектроскопії для аналізу конформаційного поліморфізму. - Чутливість коливальних смуг до зміни просторового розташування молекулярних груп. - Застосування коливальної спектроскопії для аналізу міжмолекулярних взаємодій. - Фізико-хімічні процеси при низьких температурах у системах з води, спиртів, кріопротекторів та біологічних молекул; кріохімія, кріобіофізика. - Використання сучасних наноматеріалів у техніці спектроскопічних та мас-спектрометричних експериментів; дослідження наноматеріалів (нанокластерів, наночастинок, наноструктурованих плівок та поверхонь) за допомогою спектроскопічних та мас-спектрометричних методик. Нанобіофізичні дослідження. - Аналіз досягнень науковців ФТІНТ НАН України у молекулярно-фізичних та біофізичних дослідженнях за матеріалами відповідних звітів та публікацій останніх років.
Підсумковий контроль, форма	Іспит
Пререквізити	Вивчення дисципліни передбачає володіння базовими знаннями та навиками з курсів загальної фізики, молекулярної фізики, термодинаміки, фізики конденсованого стану, фізики кластерів та наносистем, біофізики та фізики біополімерів, а також розрахункових методик і методів комп'ютерного моделювання, отриманих під час здобуття ступеня магістра.
Постреквізити	Основні положення навчальної дисципліни повинні допомогти аспірантам поєднати сучасні теоретичні та експериментальні методики та концепції, побачити перспективи подальших наукових досліджень у галузі молекулярної фізики та нанобіофізики.

Назва п/п	Коротка інформація																																		
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	В процесі навчання використовуються лекції, презентації, методичні матеріали та спеціальна література, а також спеціалізовані інтернет-ресурси для on line та дистанційного навчання при виконанні самостійних робіт.																																		
Необхідне обладнання	Технічні засоби, необхідні для демонстрації презентацій, загально вживані програми і операційні системи, доступ до інтернет-ресурсів.																																		
Шкала оцінювання	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою:</p> <table border="1" data-bbox="645 724 1865 1289"> <thead> <tr> <th data-bbox="645 724 913 786">СУМА БАЛІВ</th> <th data-bbox="913 724 1189 786">ОЦІНКА ЄКТС</th> <th colspan="2" data-bbox="1189 724 1865 786">ОЦІНКА ЗА НАЦІОНАЛЬНОЮ ШКАЛОЮ</th> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <th data-bbox="1189 786 1541 849">екзамен</th> <th data-bbox="1541 786 1865 849">залік</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="645 849 913 911">90-100</td> <td data-bbox="913 849 1189 911">A</td> <td data-bbox="1189 849 1541 911">відмінно</td> <td data-bbox="1541 849 1865 1289" rowspan="4">зараховано</td> </tr> <tr> <td data-bbox="645 911 913 973">82-89</td> <td data-bbox="913 911 1189 973">B</td> <td data-bbox="1189 911 1541 973">добре</td> </tr> <tr> <td data-bbox="645 973 913 1035">75-81</td> <td data-bbox="913 973 1189 1035">C</td> <td data-bbox="1189 973 1541 1035"></td> </tr> <tr> <td data-bbox="645 1035 913 1098">64-74</td> <td data-bbox="913 1035 1189 1098">D</td> <td data-bbox="1189 1035 1541 1098">задовільно</td> </tr> <tr> <td data-bbox="645 1098 913 1160">60-63</td> <td data-bbox="913 1098 1189 1160">E</td> <td data-bbox="1189 1098 1541 1160"></td> <td data-bbox="1541 1160 1865 1289" rowspan="3">не зараховано</td> </tr> <tr> <td data-bbox="645 1160 913 1222">35-59</td> <td data-bbox="913 1160 1189 1222">FX</td> <td data-bbox="1189 1160 1541 1222">незадовільно</td> </tr> <tr> <td data-bbox="645 1222 913 1289">1-34</td> <td data-bbox="913 1222 1189 1289">F</td> <td data-bbox="1189 1222 1541 1289"></td> </tr> </tbody> </table>				СУМА БАЛІВ	ОЦІНКА ЄКТС	ОЦІНКА ЗА НАЦІОНАЛЬНОЮ ШКАЛОЮ				екзамен	залік	90-100	A	відмінно	зараховано	82-89	B	добре	75-81	C		64-74	D	задовільно	60-63	E		не зараховано	35-59	FX	незадовільно	1-34	F	
СУМА БАЛІВ	ОЦІНКА ЄКТС	ОЦІНКА ЗА НАЦІОНАЛЬНОЮ ШКАЛОЮ																																	
		екзамен	залік																																
90-100	A	відмінно	зараховано																																
82-89	B	добре																																	
75-81	C																																		
64-74	D	задовільно																																	
60-63	E		не зараховано																																
35-59	FX	незадовільно																																	
1-34	F																																		
Критерії оцінювання	<table border="0" data-bbox="405 1289 2096 1374"> <tr> <td data-bbox="405 1289 1077 1374">Кількість балів</td> <td data-bbox="1077 1289 2096 1374">Критерії оцінювання</td> </tr> </table>	Кількість балів	Критерії оцінювання																																
Кількість балів	Критерії оцінювання																																		

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>90-100 У відповіді повністю розкрито зміст питання. Матеріал викладено логічно, аргументовано, мова є грамотною, науковий стиль викладення матеріалу, вільне володіння термінологічним апаратом дисципліни. У відповіді продемонстровано високий рівень володіння матеріалом, що входить до навчальної програми, та продемонстровано високі практичні навички.</p> <p>75-89 Відповідь досить повно розкриває зміст питання або розкриває основні (найважливіші) аспекти у запитанні, слухач володіє термінологічним апаратом дисципліни. У викладеному матеріалі слухач має помилки із аргументацією відповіді, недостатня логічність та послідовність викладення матеріалу. У відповіді продемонстровано високий рівень володіння матеріалом, що було викладено на лекціях, та середній рівень володіння практичним матеріалом.</p> <p>60-74 Відповідь на контрольне питання є неповною, розкриває тільки деякі аспекти навчального матеріалу. Слухач припускається помилок у використанні термінології навчальної дисципліни. Рівень володіння матеріалом, що було викладено на лекціях, додатковим та практичним матеріалом є середнім.</p> <p>35-59 У відповіді допущено суттєві помилки, які свідчать про незнання лекційного матеріалу або обов'язкової літератури; слухач слабо володіє термінологією дисципліни.</p> <p>1-34 Відповідь практично відсутня, слухач демонструє незнання лекційного матеріалу або обов'язкової літератури; не володіє термінологією</p>
Питання до іспиту/заліку	<ol style="list-style-type: none"> 1. Історія формування наукових уявлень про атомну будову речовини, молекули та масу. 2. Поняття маси. Одиниці вимірювання маси атомів і молекул. Фізичний сенс наступних визначень мас молекул: номінальна, моноізотопна, середня маса. 3. Що таке дефект маси, значення цього ефекту для мас-спектрометричних вимірювань. 4. Що таке ізотопи. Стабільні та радіоактивні ізотопи. Розрахунок ізотопних розподілів для поліізотопних сполук. Ізотопна мас-спектрометрія, приклади застосування ізотопного аналізу в різних галузях природничих наук. 5. Принципова схема мас-спектрометричної установки. Типи мас-аналізаторів. Принципи розділення іонів за масами у різних видах мас-аналізаторів. 6. Дайте опис загального виду мас-спектра: які величини відкладаються по осях координат і одиниці їх вимірювання; види іонів, що реєструються у мас-спектрі. 7. Десорбційні методи в мас-спектрометричному аналізі: вторинно-іонна мас-спектрометрія, лазерна десорбція, матрично-активована лазерна десорбція. Фізичні принципи, галузі використання. 8. Фізика кластерів. Фізичні, хімічні, біологічні, ковалентні, нековалентні кластери, нанокластери: структурна організація, термодинамічні параметри. 9. Застосування методу мас-спектрометрії в молекулярній біофізиці та біомедицині: прилади, принципи, методики,

Назва п/п	Коротка інформація
	<p>прикладі.</p> <ol style="list-style-type: none"> 10. Дослідження наноматеріалів (нанокластерів, наночастинок, наноструктурованих плівок та поверхонь) за допомогою спектроскопічних та мас-спектрометричних методик. 11. Види руху в молекулах і типи молекулярних спектрів. Електронні, коливальні і обертальні спектри молекул. 12. Інфрачервоні спектри поглинання і спектри комбінаційного розсіювання світла. 13. Наближення Борна-Оппенгеймера. Формулювання та обґрунтування застосовності. 14. Врахування симетрії молекул при аналізі коливальних спектрів. Віднесення коливальних смуг і їх теоретична інтерпретація. 15. Застосування коливальної спектроскопії для аналізу міжмолекулярних взаємодій. 16. Вплив водневих зв'язків на стан і інтенсивність коливальних смуг. 17. Чутливість коливальних смуг до зміни просторового розташування молекулярних груп. 18. Правила відбору в коливальних спектрах. 19. Основні принципи методу молекулярної динаміки. 20. Методи розрахунків коливальних спектрів.
<p>Література для вивчення дисципліни:</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Кикоин А. К., Кикоин И. К. Молекулярная физика. 2-е изд. М.: Наука, 1976. 2. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. М.: Наука, 1975. — 592с. 3. Булавін Л. А., Гаврюшенко Д. А., Сисоєв В. М. Молекулярна фізика. — К. : Знання, 2006. — 567 с. — ISBN 966-346-223-X. (укр.) 4. Курс фізики : Навч. посіб. для студ. хім. і біол. спец. ун-тів. Ч. 2. Молекулярна фізика / Р. М. Кушнір; Львів. нац. ун-т ім. І.Франка. - Л., 2000. - 148 с. 5. Молекулярна фізика : підручник / П. М. Якібчук, М. М. Клим. – Видання 2-ге, доповнене – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2015. – 584 с. – ISBN 978-966-613-975-0 6. Основи молекулярної фізики та термодинаміки : навч. посіб. / В. М. Ігнатенко ; М-во освіти і науки, молоді та спорту України, Сум. держ. ун-т. – Суми : Сум. держ. ун-т, 2011. – 249 с. – ISBN 978-966-657-407-0 7. Квасников И. А. Молекулярная физика. — М. : URSS, 2011. — 232 с. 8. Сивухин Д. В. Термодинамика и молекулярная физика // Общий курс физики. — М. : Физматлит, 2002. — Т. 2. — 576 с. 9. Алешкевич В.А. Молекулярная физика. Учебник. — М.: Физматлит, 2016. — 308 с. — (Университетский курс общей физики). — ISBN 978-5-9221-1696-1. 10. Bransden B.H., Joachain C.J. Physics of Atoms and Molecules (2nd Ed.). London: Pearson Education LTD, 2003. - ISBN-10: 0-582-35692-X, ISBN-13: 978-0582356924

Назва п/п	Коротка інформація
	<p>(https://books.google.com.ua/books?id=i5IPWXDQlcIC&printsec=frontcover&hl=ru&source=gbs_ge_summary_r&cad=0#v=onepage&q&f=false)</p> <p>11. L.T. Chen L.T. Atomic, molecular and optical physics: new research. - New York: Nova Science Publishers Inc., 2009. – 538 p. ISBN: 1604569077.</p> <p>12. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: БИНОМ, 2003. – 493 с.</p> <p>13. Экман Р., Зильберинг Е., Вестман-Бринкмальм Э., Край А. Масс-спектрометрия: аппаратура, толкование и приложения. - М.: Техносфера, 2013. – 368 с. (ISBN: 978-5-94836-364-6)</p> <p>14. Терентьев П.Б., Станквявичус А.П. Масс-спектрометрический анализ биологически активных азотистых оснований. – Вильнюс: Мокслас, 1987. – 280 с.</p> <p>15. Зякун А.М. Теоретические основы изотопной масс-спектрометрии в биологии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений. – Пушино: «Фотон-век», 2010. – 224 с. ISBN 978-5-903789-25-2</p> <p>16. Косевич М.В., Шелковский В.С. Прогресс техники биомедицинского масс-спектрометрического эксперимента как пример влияния потребностей общества на развитие науки // Вісник Харківського університету N 497, Біофізичний вісник, вип. 2. - 2000. - С. 84-99.</p> <p>17. Покровський В.О. Десорбційна мас-спектрометрія: фізика, фізична хімія, хімія поверхні // Вісник НАН України. – 2012. №12. – С. 28-49.</p> <p>18. Kaltashov I.A. Mass spectrometry in structural biology and biophysics: architecture, dynamics, and interaction of biomolecules / I.A. Kaltashov, S.J. Eyles Edts, 2nd edition – Hoboken: John Wiley, 2012. – 289 p.</p> <p>19. Яблонь Л.С., Бойчук В.М. Фізичні основи нанотехнологій. Курс лекцій. – Івано-Франківськ, 2015. – 103 с.</p> <p>20. Азаренков Н.А., Веревкин А.А., Ковтун Г.П., Основы нанотехнологий и наноматериалов. Навчальний посібник. – Харків, ХНУ ім. Каразіна, 2009. - 69 с.</p> <p>21. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: КомКнига, 2006. – 592 с.</p> <p>22. Оуэнс Ф., Пул-мл. Ч. Нанотехнологии. Изд.: Техносфера. 2010. 336 с.</p> <p>23. Dunkin I.R., Matrix-isolation techniques - a practical approach, Oxford University Press, Oxford, New York, 1998.</p> <p>24. Cradock S., Hinchcliffe A.J., Matrix Isolation, Cambridge University Press, 2011.</p> <p>25. Karachevtsev V.A., Nanobiophysics: Fundamentals and Applications, Singapore: Pan Stanford, 2015.</p>
Додаткова література	<ol style="list-style-type: none"> 1. http://www.spectroscopynow.com – безкоштовний сайт спектроскопічного товариства, який містить розділи стосовно різних спектроскопічних методів, зокрема Base Peak, присвячений мас-спектрометрії 2. http://www.asms.org/whatisms/page_index.html - Сайт Американського мас-спектрометричного товариства; сторінка з питаннями-відповідями для починаючих користувачів 3. www.ionsourcw.com - інформаційний сайт з корисними посиланнями стосовно основ та техніки спектроскопічних експериментів

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	4. http://www.ncbi.nlm.nih.gov/literature - пошукова машина публікацій 5. https://webbook.nist.gov/ — Довідник фізико-хімічних параметрів сполук Національного Інституту стандартів та технологій США NIST 6. https://www.youtube.com/watch?v=Vdh6WNB_Pj0 - Масс-спектрометрия - лекція професора А.Т. Лебедева.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.