

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. директора  
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України



«16» 09

М.І. Голушук  
2020 р.

**ПРОГРАМА**

навчальної дисципліни

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

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

|   |                                   |
|---|-----------------------------------|
| <i>Рівень вищої освіти</i>  | <u>третій (освітньо-науковий)</u> |
| <i>Освітня програма</i>   | <u>доктор філософії</u>           |
| <i>Форма навчання</i>   | <u>денна</u>                      |
| <i>Загальний обсяг у кредитах</i>                                 |                                   |
| <i>Європейської кредитної трансферно-накопичувальної системи:</i> | <u>4 кредити ЄКТС</u>             |

Харків - 2020

РОЗРОБЛЕНО ТА ВНЕСЕНО:

Фізико–технічним інститутом низьких температур ім. Б. І. Веркіна  
Національної академії наук України  
(повне найменування вищого навчального закладу)

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

**Косевич Марина Вадимівна** - доктор фізико-математичних наук, с. н. с., провідний науковий співробітник відділу молекулярної біофізики Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України.

**Степаньян Степан Григорович** - доктор фізико-математичних наук, с. н. с., провідний науковий співробітник відділу молекулярної біофізики Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України.

Програма затверджена Вченою радою Фізико–технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України, «    » \_\_\_\_\_ 2020 р., протокол № \_\_\_\_.

## 1. Опис навчальної дисципліни

| Найменування показників  | Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень | Характеристика навчальної дисципліни |
|--|--|--------------------------------------|
|  |  | денна форма навчання                 |
| Кількість кредитів – 4   | Галузі знань:<br>- «10 Природничі науки»                         | Обов'язковий                         |
| Загальна кількість годин – 120 (36 аудиторних)   | Спеціальність:<br>- «104 Фізика та астрономія»                   |                                      |
| Тижневих годин для денної форми навчання аудиторних – 2 самостійної роботи здобувача – 8 | Освітньо-науковий рівень: доктор філософії                       | <i>Лекції, годин</i>                 |
|  |  | 30                                   |
|  |  | <i>Семінари, годин</i>               |
|  |  | 6                                    |
|  |  | <i>Самостійна робота, годин</i>      |
|  |  | 84                                   |
|  |  | <i>Вид контролю</i>                  |
|  |  | Іспит                                |

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

**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 ФГІНТ 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.

### Завдання:

- Навчити аспірантів застосовувати базові знання в галузі молекулярної фізики і біофізики до виконання конкретних науково-дослідницьких робіт.

У результаті вивчення курсу аспірант повинен

### знати:

- 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.

**вміти:**

- 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.

Внаслідок вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен бути здатним продемонструвати такі **програмні результати навчання** (згідно з освітньо-науковою програмою «ФІЗИКА»):

**знання:**

- 1) здобуття поглиблених знань і розумінь в фізиці та споріднених областях, включаючи методики проведення експериментів та/або теоретичних наукових досліджень (ПРН-1.1);
- 2) здатність продемонструвати поглиблені знання у вибраній спеціалізації (ПРН-1.2);
- 3) здатність ясно та ефективно описувати результати наукової роботи (ПРН-1.3);
- 4) здатність вести спеціалізовані наукові семінари та публікувати наукові статті в вітчизняних та закордонних наукових журналах (ПРН-1.4);
- 5) здатність робити огляд та пошук інформації в спеціалізованій літературі, використовуючи різноманітні ресурси: журнали, бази даних, он-лайн ресурси (ПРН-1.5);
- 6) здатність підготувати та успішно захистити дисертаційну роботу на основі індивідуальних досліджень (ПРН-1.6);
- 7) досягнення відповідних знань, розумінь та здатностей використання методів аналізу даних та статистики на найбільш сучасному рівні (ПРН-1.7).

**уміння:**

- 1) здійснювати пошук, аналізувати і критично оцінювати інформацію з різних джерел (ПРН-2.1);
- 2) самостійно планувати та виконувати експерименти, оцінювати отримані результати (ПРН-2.2);
- 3) обирати методи і моделювати явища та процеси різної складності при вирішенні фізичних задач з урахуванням спеціалізації в конкретних галузях фізики конденсованого стану (ПРН-2.3);
- 4) поєднувати теорію і практику, а також приймати рішення та виробляти стратегію діяльності для вирішення завдань спеціалізації з урахуванням загальнолюдських цінностей, суспільних, державних та виробничих інтересів (ПРН-2.4);
- 5) застосовувати знання і розуміння для розв'язування задач синтезу та аналізу елементів та систем, характерних обраній спеціалізації (ПРН-2.5);
- 6) ефективно працювати як індивідуально, так і у складі команди (ПРН-2.6);
- 7) застосовувати системний підхід, інтегруючи знання з інших дисциплін та враховуючи нетехнічні аспекти, підчас розв'язання науково-дослідних завдань з обраної спеціалізації та проведення досліджень (ПРН-2.7);
- 8) аргументувати вибір методів розв'язування спеціалізованої задачі, критично оцінювати отримані результати та захищати прийняті рішення (ПРН-2.8);
- 9) підготувати запит на отримання фінансування, звітну документацію (ПРН-2.9).

10) формулювати науково і технічно значиму проблематику, володіти різними формами її публічної презентації (он-лайн презентації, публічні лекції, науково-популярні тексти тощо) (ПРН-2.10).

Здобути комунікативні навички та набути навичок працювати автономно і відповідально:

- 1) ефективно спілкуватись на професійному та соціальному рівнях, включаючи усну та письмову комунікацію іноземною мовою (ПРН-3.1);
- 2) кваліфіковано представляти та обговорювати отримані результати та здійснювати трансфер набутих знань (ПРН-3.2).
- 3) здатність адаптуватись до нових умов та самостійно приймати рішення (ПРН-4.1);
- 4) здатність усвідомлювати необхідність навчання впродовж усього життя з метою поглиблення набутих та здобуття нових фахових знань (ПРН-4.2);
- 5) здатність відповідально ставитись до виконуваної роботи та досягати поставленої мети з дотриманням вимог професійної етики (ПРН-4.3);
- 6) здатність самовдосконалюватися, нести відповідальність за новизну наукових досліджень та прийняття експертних рішень (ПРН-4.4);
- 7) здатність демонструвати розуміння засад охорони праці, електробезпеки та їх застосування (ПРН-4.5).

Вивчення навчальної дисципліни передбачає формування та розвиток у аспірантів загальних та фахових **компетентностей**:

ЗК-1 Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу;

ЗК-2 Здатність проведення досліджень на відповідному рівні;

ЗК-5 Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації;

ЗК-8 Здатність бути критичним і самокритичним;

ЗК-9 Здатність до практичного застосування знань;

ЗК-10 Вміння виявляти, ставити та вирішувати проблеми;

ЗК-11 Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК-12 Здатність до наукового мислення, зокрема володіння загальнонауковими (філософськими) компетентностями, спрямованими на формування системного наукового світогляду, професійної етики та загального культурного кругозору.

ЗК-13 Здатність дотримуватись морально-етичних правил поведінки, а також академічної доброчесності, характерних для учасників академічного середовища.

ФК-1 Концептуальні та методологічні знання щодо історії розвитку та сучасного стану наукових досліджень з основних напрямів фізики.

ФК-2 Поглибленні спеціалізовані знання з того напрямку сучасної фізики, який був обраний для проведення власного наукового дослідження, та розуміння сучасних фізичних теорій і методів, спроможність до їхнього аналізу та ефективного застосування в практиці наукової та науково-педагогічної діяльності і проведенні досліджень.

ФК-4 Здатність виконувати оригінальні дослідження, досягати наукових результатів, які створюють нові знання у фізиці і дотичних до неї міждисциплінарних напрямках і можуть бути опубліковані у провідних наукових виданнях з фізики та суміжних галузей.

ФК-6 Здатність самовдосконалюватися, презентувати результати досліджень фахівцям і нефхівцям.

ФК-7 Здатність до формулювання наукових задач та планування стратегій їхнього розв'язання з можливістю інтеграції знань з різних наукових сфер та застосуванням системного підходу в практичній діяльності.

ФК-10 Здатність підготувати та успішно захистити дисертаційну роботу на основі узагальнення власних експериментальних або теоретичних досліджень з фізики.

ФК-11 Здатність інтегрувати знання з інших дисциплін, застосовувати системний підхід та враховувати комплексні аспекти при розв'язанні проблемних завдань та проведенні наукових досліджень.

ФК-12 Знати та вміти застосовувати фундаментальні знання з фізики конденсованого стану для аналізу явищ та процесів, які відбуваються в твердих тілах і рідинах, знати основні закономірності утворення структури твердих тіл та взаємозв'язок структури з фізичними властивостями твердих тіл, вміти використовувати основні принципи сучасної фізики конденсованого стану до виконання

конкретних науково-дослідних робіт зі спеціальності.

ФК-14 Знати основні поняття теорії електронних і фононних спектрів твердих тіл і експериментальних методів їх дослідження, положення квантової теорії і статистичної фізики кристалічних систем та вміти проводити аналіз різноманітних властивостей твердих тіл на основі електронних та фононних спектрів кристалів.

ФК-19 Знати сучасний стан фізики мезо- та наноскопічних систем і наноструктур, сучасні методи їх отримання і експериментального дослідження, а також проблеми і перспективи розвитку фізики наноструктур і нанотехнологій, вміти обґрунтовано вирішувати фізичні задачі в рамках своєї спеціальності, використовуючи міждисциплінарні знання з нанотехнологій і наноматеріалів

ФК-20 Знати молекулярну будову речовини та природу фізичних процесів на молекулярному рівні, зокрема, на рівні окремих молекул, сучасні актуальні напрями фундаментальних досліджень в області молекулярної фізики, молекулярної біофізики, нанофізики та нанобіофізики. Знати та вміти використовувати сучасні методи дослідження структури, маси, енергії та інших характеристик ізольованих молекул і їх міжмолекулярних взаємодій при самостійному виконанні конкретних науково-дослідницьких робіт.

### **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.

### **3. Анотація навчальної дисципліни**

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.

## 4. Структура навчальної дисципліни

### **Тема 1. Основні поняття молекулярної фізики та фізики біомакромолекул.**

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.

### **Тема 2. Маса атомів та молекул. Ізотопи.**

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.

### **Тема 3. Основи методу мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометричної установки.**

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». Тандемна мас-спектрометрія (МСn). 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.

Огляд сучасних лабораторних та комерційних приладів, аналіз ринку фірм-виробників мас-спектрометричного обладнання.

### **Тема 4. Методи іонізації/десорбції неорганічних, органічних, біологічних молекул.**

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 переводу 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. Нобелівські премії в області мас-спектрометрії. Внесок мас-спектрометрії у вирішення низки фундаментальних проблем фізики та хімії.

### **Тема 5. Визначення молекулярно-фізичних параметрів речовини за допомогою мас-спектрометрії**

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. Секвкнування полімерів та біополімерів. Методики визначення термодинамічних параметрів міжмолекулярних взаємодій. Електронні параметри атомів та молекул: енергія (потенціал) іонізації, спорідненість до електрона.

## **Тема 6. Фізика кластерів. Нанотехнології. Низькотемпературна мас-спектрометрія.**

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.

Низькотемпературна мас-спектрометрія. Низькотемпературна мас-спектрометрія: фізичні принципи та приборне втілення. Застосуванні до фізики води та льоду.

## **Тема 7. Застосування методу мас-спектрометрії в молекулярній біофізиці та біомедицині**

Невалентні міжмолекулярні взаємодії органічних та біологічних молекул. Визначення термодинамічних параметрів міжмолекулярних взаємодій біомолекул. Рівняння Арреніуса. Кореляції між біофізичними спектроскопічними дослідженнями плавлення ДНК та мас-спектрометричними експериментами методом електророзпилення для моделювання цього процесу. Внесок науковців ФГПНТ 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.

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.

## **Тема 8. Науково-організаційне супроводження наукових досліджень.**

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.

## **Тема 9. Спектральні методи дослідження структури молекул.**

Інфрачервона спектроскопія. Головні характеристики ІЧ-випромінювання. Види та енергія коливань молекул. Характеристичні коливання. Поглинання випромінювання. Ультрафіолетова спектроскопія. Раман-спектроскопія. Джерела збуджуючого світла.

## **Тема 10. Сучасні методи дослідження структури молекул в ізольованому стані.**

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.

## **Тема 11. Низькотемпературна спектроскопія молекул у матрицях інертних газів.**

Сучасні установки для матричної ізоляції. Системи наповнення матриць і контроль концентрації. Реєстрація і обробка спектрів. Матричні ефекти. Температурний відпал матриць.

## **Тема 12. Конформаційна структура молекул.**

Особливості дослідження структури конформаційно-лабільних молекул. Застосування методу матричної ізоляції для дослідження міжмолекулярних комплексів. Контрольовані зміни структури матрично-ізольованих молекул. Конформаційне охолодження молекул.



**Тема 13. Вплив УФ та ІЧ опромінення на структуру молекул.**

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.

**Тема 14. Сучасні методи квантово-механічних розрахунків.**

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.

**Тема 15. Методи комп'ютерного моделювання структури та спектрів молекул.**

Особливості комп'ютерного моделювання матрично-ізолюваних молекул. Метод молекулярної динаміки. Силкові поля. Моделювання процесів наплення матриць. Квантово-механічні методи розрахунків матричних кластерів. Врахування впливу матриці на спектри ізолюваних молекул. Матричні зсуви і матричне розщеплення спектральних смуг.

## Загальна структура навчальної дисципліни

| №  | Назва теми   | у тому числі |               |                 |                          |
|----|--|--------------|---------------|-----------------|--------------------------|
|    |  | Усього       | Лекції, годин | Семинар, годин. | Самостійна робота, годин |
| 1. | Молекулярно-фізичні дослідження на рівні окремих молекул | 70           | 16            | 4               | 48                       |
| 2. | Структура і властивості ізольованих молекул              | 50           | 14            | 2               | 36                       |
|    | Усього, годин  | 120          | <b>30</b>     | <b>6</b>        | 84                       |

### Теми лекційних занять

| №   | Назва лекції   | Кількість годин |
|-----|--|-----------------|
|     | Тема 1. Молекулярно-фізичні дослідження на рівні окремих молекул                   |                 |
| 1.  | Основні поняття молекулярної фізики та фізики біомакромолекул                      | 2               |
| 2.  | Маса атомів та молекул. Ізотопи.   | 2               |
| 3.  | Основи методу мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометричної установки.        | 2               |
| 4.  | Методи іонізації/десорбції неорганічних, органічних, біологічних молекул.          | 2               |
| 5.  | Визначення молекулярно-фізичних параметрів речовини за допомогою мас-спектрометрії | 2               |
| 6.  | Фізика кластерів. Нанотехнології. Низькотемпературна мас-спектрометрія             | 2               |
| 7.  | Застосування методу мас-спектрометрії в молекулярній біофізиці та біомедицині.     | 2               |
| 8.  | Науково-організаційне супроводження наукових досліджень.                           | 2               |
|     | Тема 2. Структура і властивості ізольованих молекул                                |                 |
| 9.  | Спектральні методи дослідження структури молекул.                                  | 2               |
| 10. | Сучасні методи дослідження структури молекул в ізольованому стані.                 | 2               |
| 11. | Низькотемпературна спектроскопія молекул у матрицях інертних газів.                | 2               |
| 12. | Конформаційна структура молекул.   | 2               |
| 13. | Вплив УФ та ІЧ опромінення на структуру молекул.                                   | 2               |
| 14. | Сучасні методи квантово-механічних розрахунків.                                    | 2               |
| 15. | Методи комп'ютерного моделювання структури та спектрів молекул.                    | 2               |
|     | <b>Разом</b>   | <b>30</b>       |

## Теми семінарських занять

| № | Назва теми   | Кількість годин |
|---|--|-----------------|
|   | Тема 1. 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.  | 2               |
|   | Тема 2. 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.  | 2               |
|   | Тема 3. 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 | 2               |
|   | <b>Разом</b>   | <b>6</b>        |

## Самостійна робота

| №  | Назва теми  | Кількість годин |
|----|---|-----------------|
|    |   |                 |
| 1. | 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.  | 6               |
| 2. | Термодинамічні параметри міжмолекулярних взаємодій: експериментальні та теоретичні методи встановлення.   | 6               |
| 3. | Взаємодія іонізуючих факторів (електрони, прискорені іони та атоми, нанокластери, фотони, лазерні імпульси) з речовиною. Застосування при розробці методів іонізації/десорбції речовини. Переріз зіткнень та іонізації. Довжина вільного пробігу. | 6               |
| 4. | Розрахунок ізотопних співвідношень для поліізотопних молекул, пошук та порівняння можливостей сучасних комп'ютерних програм. Відображення ізотопів елементів у таблиці Менделєєва.  | 6               |
| 5. | Первинна інформація стосовно обробки та аналізу мас-спектрів органічних сполук та біомолекул. Методи інтерпретації мас-спектрів.  | 6               |
| 6. | Аналіз будови різноманітних сучасних мас-спектрометричних приладів за матеріалами фірм-виробників експериментальної техніки.  | 6               |
| 7. | Пошук та перегляд Інтернет-ресурсів з демонстрацією роботи сучасних мас-спектрометричних приладів, методів підготовки зразків, обробки даних.   | 6               |

|     |  |           |
|-----|--|-----------|
| 8.  | Фізика кластерів. Фізичні, хімічні, ковалентні, нековалентні кластери неорганічних і органічних сполук. Методи отримання та дослідження.   | 6         |
| 9.  | Аналіз коливальних спектрів багатоатомних молекул. Віднесення коливальних смуг і їх теоретична інтерпретація.  | 4         |
| 10. | Застосування коливальної спектроскопії для аналізу конформаційного поліморфізму.   | 6         |
| 11. | Чутливість коливальних смуг до зміни просторового розташування молекулярних груп.  | 4         |
| 12. | Застосування коливальної спектроскопії для аналізу міжмолекулярних взаємодій.  | 6         |
| 13. | Фізико-хімічні процеси при низьких температурах у системах з води, спиртів, кріопротекторів та біологічних молекул; кріохімія, кріобіофізика.  | 6         |
| 14. | 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. | 6         |
| 15. | Аналіз досягнень науковців ФТІНТ НАН України у молекулярно-фізичних та біофізичних дослідженнях за матеріалами відповідних звітів та публікацій останніх років.  | 4         |
|     | Усього   | <b>84</b> |

## 5. Методи навчання

**МН1 – Лекції.** Лекційний матеріал охоплює центральні та найбільш складні проблеми сучасної молекулярної фізики, біофізики, нанобіофізики. Простіші питання, що добре висвітлені в літературі, виносяться на самостійне вивчення.

**МН2 – Семінарські заняття.** Семінарські заняття передбачають самостійне вивчення аспірантами за завданням викладача окремих питань і тем лекційного курсу з наочним оформленням матеріалу у вигляді реферату, доповіді, повідомлення тощо. Семінарські заняття дають змогу викладачам ближче познайомитися з аспірантами, донести до них необхідну інформацію, а відтак перевірити, як вони засвоїли її, як користуються нею в навчальній і науковій роботі. Викладач має змогу враховувати теоретичну і практичну підготовку аспіранта, його індивідуальні особливості і здібності, що зумовлює підвищення рівня підготовки кожного аспіранта.

**МН4 – Самостійна робота.** Робота здобувачів носить в основному самостійний характер. Вони самостійно роблять пошук наукової літератури і опрацьовують її, консультуючись з викладачем. Таким чином вони удосконалюють набуті раніше навички роботи з літературою за фахом. Основна увага приділяється формуванню та засвоєнню базових знань в галузі молекулярної фізики і біофізики та вмінню застосовувати їх до виконання конкретних науково-дослідних робіт зі спеціальності.

**МН3, МН5 –** демонстрація презентацій, використання засобів мультимедіа, дистанційні заняття з використанням комп'ютерних засобів.

## 6. Методи діагностики знань

### ФОРМИ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ (ФО)

**ФО1** – відвідування лекцій та творчий підхід в процесі наукового пошуку (20 балів);

**ФО2** – самостійна робота, опрацювання літератури та електронних джерел за темою дослідження (20 балів);

**ФО4** – відповідь на семінарі та використання сучасних інформаційних технологій при підготовці відповіді (20 балів);

**ФО5** – робота в команді при виконанні завдань самостійної роботи та на семінарі (5 балів);

**ФО6, ФО8, ФО9, ФО10** – підготовка та оформлення реферату та презентації, використання у доповіді прикладів реальних фізичних об'єктів, що пов'язані з дисертаційним дослідженням (20 балів).

Екзамен (15 балів)

Всього: 100 балів.

### Шкала оцінювання

| Сума балів | Оцінка за національною шкалою |               |
|------------|-------------------------------|---------------|
|            | для екзамену                  | для заліку    |
| 90 – 100   | відмінно                      | зараховано    |
| 80-89      | добре                         |               |
| 70-79      |                               |               |
| 60-69      | задовільно                    |               |
| 50-59      |                               |               |
| 1-49       | незадовільно                  | не зараховано |

## 7. Критерії оцінювання результатів навчання

| Кількість балів | Критерії оцінювання  |
|-----------------|--|
| 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.  |
| 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. |
| 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.   |
| 35-59           | У відповіді допущено суттєві помилки, які свідчать про незнання лекційного матеріалу або обов'язкової літератури; слухач слабо володіє термінологією дисципліни.   |
| 1-34            | Відповідь практично відсутня, слухач демонструє незнання лекційного матеріалу або обов'язкової літератури; не володіє термінологією  |

## 8. Навчально-методичне забезпечення

На початку семестру здобувачі отримують:

1. Робочу програму, що містить перелік тем, список рекомендованої літератури та інформаційних ресурсів, критерії та шкалу оцінювання; контрольні запитання до іспиту;
2. Пакет літератури, що містить основні підручники, навчальні та методичні посібники в електронній формі (формати .pdf та .djvu),

## 9. Питання до заліку/екзамену

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, приклади.
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.

## 10. Рекомендована література

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 (2<sup>nd</sup> Ed.). London: Pearson Education LTD, 2003. - ISBN-10: 0-582-35692-X, ISBN-13: 978-0582356924
11. L.T. Chen L.T. Atomic, molecular and optical physics: new research. - New York: Nova Science Publishers Inc., 2009. – 538 p. ISBN: 1604569077.
12. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: БИНОМ, 2003. – 493 с.
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)
14. Терентьев П.Б., Станквячус А.П. Масс-спектрометрический анализ биологически активных азотистых оснований. – Вильнюс: Мокслас, 1987. – 280 с.
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
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.
17. Пкровський В.О. Десорбційна мас-спектрометрія: фізика, фізична хімія, хімія поверхні // Вісник НАН України. – 2012. №12. – С. 28-49.
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.
19. Яблонь Л.С., Бойчук В.М. Фізичні основи нанотехнологій. Курс лекцій. – Івано-Франківськ, 2015. – 103 с.
20. Азаренков Н.А., Веревкин А.А., Ковтун Г.П., Основи нанотехнологій и наноматеріалів. Навчальний посібник. – Харків, ХНУ ім. Каразіна, 2009. - 69 с.
21. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: КомКнига, 2006. – 592 с.
22. Оуэнс Ф., Пул-мл. Ч. Нанотехнологии. Изд.: Техносфера. 2010. 336 с.
23. Dunkin I.R., Matrix-isolation techniques - a practical approach, Oxford University Press, Oxford, New York, 1998.
24. Cradock S., Hinchcliffe A.J., Matrix Isolation, Cambridge University Press, 2011.
25. Karachevtsev V.A., Nanobiophysics: Fundamentals and Applications, Singapore: Pan Stanford, 2015.

## Інтернет-ресурси

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](http://www.asms.org/whatisms/page_index.html) - Сайт Американського мас-спектрометричного товариства; сторінка з питаннями-відповідями для починаючих користувачів
3. [www.ionsourcw.com](http://www.ionsourcw.com) - інформаційний сайт з корисними посиланнями стосовно основ та техніки спектроскопічних експериментів
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