

УДК 541.1

Г.О. Сіренко, М.І. Мартинюк, Л.М. Солтис

## Фізичні методи дослідження речовин (курс лекцій). Вступ

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76018, Україна*

Приведений поступ науки фізичних методів дослідження речовин, витоки цієї науки з аналітичної хімії, формулювання 32-х основних фундаментальних фізико-хімічних законів, дана загальна характеристика фізичних методів дослідження речовин.

**Ключові слова:** фізичні методи, методи дослідження, речовина, фізико-хімічні закони, точність методу, надійність методу.

H.O. Sirenko, M.I. Martyniuk, L.M. Soltys

## Physical Methods of Investigation of Substances (Lectures). Introduction

*Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,  
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine*

Reproduced beginning physical science research methods substances origins science of analytical chemistry, formulation of 32 major fundamental physico-chemical laws, the general characteristic physical methods of research materials.

**Key words:** physical methods, research methods, substance, physico-chemical methods laws, the accuracy of the method, the reliability of the method.

*Стаття поступила до редакції 17.03.2016; прийнята до друку 15.09.2016.*

### I. Витоки і поступ науки та предмету фізичних методів дослідження речовин

**1. Фізико-хімічні методи аналізу речовин** мають свої витоки з аналітичної хімії, яка, як наукова дисципліна, започаткована на межі XVIII та XIX століть. Фактично саме у цей час аналітична хімія стала експериментальною базою для відкриття та перевірки таких фундаментальних законів хімії, як:

- **закон еквівалентів** (1792-1802) німецького хіміка Ієремії Веніяміна Ріхтера<sup>1</sup> (Richter) (1762-1807);

- **закон сталості складу речовин** (1799-1808) французького хіміка Жозефа Луї Пруста<sup>2</sup> (Proust) (1754-1826), який набув завершеного означення у

тривалій науковій дискусії (1801-1808) Пруста з Клод Луї Бертолле (Berthollet) (1748-1822);

- **закон парціальних тисків** газів у суміші та закон залежності розчинення газів із суміші від їх парціального тиску (1803) англійського фізика і хіміка Джона Діалтона<sup>3</sup> (Dalton) (1766-1844), який був доповненням до закону про пропорційну залежність розчинності індивідуального газу від його тиску, температури та концентрації (1803) англійського хіміка Уільмана Генрі (Henry) (1774-1836); Діалтон у 1802 році [незалежно від французького фізика і хіміка Жозефа Луї Гей-Люссака (Gay-Lussac) (1778-1850) та Ж. Шарля, які теж відкрили закон у 1802 році] відкрив закон теплового розширення газів: при сталому тиску під час однакового підвищення температури всі гази розширюються однаково;

<sup>1</sup> Праці: «Основи стехіометрії або мистецтва вимірювання хімічних первнів», Том. 1 – 3 (1792-1794); «Про нові напрямки в хімії», Вип. 1-11 (1791-1802).

<sup>2</sup> Див.: Капустинский А.Ф. Жозе Луи Пруст и открытие закона постоянства состава // Труды института истории естествознания и техники АН СССР. – 1955. – Т. 6. – с. 43-67.

<sup>3</sup> Праці: див.: Сборник избранных работ по атомистике / Пер. с англ. за 1802 – 1810 г.г. – Ленинград, 1940.

• **закон об'ємних співвідношень** під час хімічних реакцій між газами Ж.Л. Гей-Люссака<sup>4</sup> (1808) тощо;

• **закон італійського фізика і хіміка Амедіо Авагадро**<sup>5</sup> (Avogadro) (1776-1826): у рівних об'ємах ідеальних газів за сталих температури та тиску міститься однакова кількість молекул (закон відкритий у 1811 році) тощо.

Ці закони були відкриті тоді, коли експериментатори – фізики і хіміки в лабораторних умовах змогли отримувати індивідуальні речовини та сполуки певного високого ступеня чистоти та піддавати їх аналізу з достатньо високою точністю та достатньо високою надійністю.

**2. Теплове інфрачервоне випромінювання** (ІЧ) було відкрито У. Гершелем у кінці XVIII ст., а ІЧ-спектри поглинання молекул вперше були отримані на початку XX ст.

До середини XIX століття переважно застосовували такі методи виокремлення індивідуальних речовин та їх сполук із суміші або руд та їх аналізу:

- осадження;
- перекристалізації;
- ректифікації;
- титрування тощо.

**3. Можливості хімічного та фізико-хімічного аналізу** значно зросли із розвитком, починаючи з середини XIX та на початку XX сторіч, нових методів:

• **емісійного спектрального аналізу** німецького хіміка Роберта Вільгельма Бунзена<sup>6</sup> (Bunsen) (1811-1899), який у 1854 році разом з німецьким фізиком Густавом Робертом Кірхгоффом<sup>7</sup> (Kirchhoff) (1824-1887) вивчали спектри полум'я, яке фарбувалося парами металічних солей, і в результаті цими вченими були закладені (1859) основи спектрального аналізу, який, після низки їх робіт, опублікованих у 1859-1860 роках, був впроваджений в експериментальну практику хімічних досліджень. За допомогою спектрального методу були відкриті цезій (1860), рубідій (1861). У 1859 році Кірхгоффом був сформульований закон теплового випромінювання та введено в науковий обіг означення абсолютно чорного тіла.

Цей закон стверджує, що відношення випромінюючої здатності  $\varepsilon(\lambda, T)$ , де  $\lambda$  – довжина хвилі випромінювання, а  $T$  – абсолютна температура, до їх поглинаючої здатності  $\alpha(\lambda, T)$  не залежить від

природи випромінюючого тіла і дорівнює випромінюючій здатності абсолютно чорного тіла  $\varepsilon_0(\lambda_0, T)$ , віднесеного до його поглинаючої здатності, яка дорівнює 1 [ $\alpha(\lambda_0, T)=1$ ] і залежить від довжини хвилі  $\lambda$  та абсолютної температури  $T$ :

$$\frac{\varepsilon(\lambda, T)}{\alpha(\lambda, T)} = \frac{\varepsilon_0(\lambda_0, T_0)}{\alpha_0(\lambda_0, T_0)} = \varepsilon_0(\lambda_0, T_0). \quad (1)$$

Функцію  $\varepsilon_0(\lambda_0, T_0)$  у явній формі надає рівняння закону випромінювання Планка.

У 1862 році Р. Бунзеном та англійським хіміком Генрі Енфілдом Ріско<sup>8</sup> (Roscoe) (1833-1915) відкритий основний і взаємозаміщеності, еквівалентності часу та інтенсивності випромінювання (освітлення) при фотохімічних реакціях, згідно якого кількість продуктів фотохімічної реакції визначається загальною кількістю енергії випромінювання, яка падає на фотохімічну систему, тобто визначається добутком потужності ( $\Phi$ ) випромінювання на час дії (витримки) ( $\tau$ ), і не залежить від співвідношення  $\Phi$  і  $\tau$ . Цей закон правдивий у тих випадках, коли вихідна фотохімічна реакція не супроводжується вторинними реакціями іншого типу і не ускладнена гальмуючою дією супутніх (супровідних) речовин, у т.ч. й самими продуктами реакції. Цей закон не правдивий також у широкому інтервалі співвідношень  $\Phi$  і  $\tau$ .

**4. Формулювання основних фундаментальних фізико-хімічних законів** зведені в табл. 1.

**5. На початку XX ст. значний розвиток** отримали електрохімічні методи аналізу (полярографії, амперометрії, хроматографії та спектроскопії). З 70 років XX ст. спостерігається широке застосування методів атомно-абсорбційного та радіоактивационного аналізів, X-променево-флюоресцентний та електроннозондовий аналізи, ядерно-магнітного резонансу (ЯМР), електронно-парамагнітного резонансу (ЕПР), ядерно-гамма резонансу (ЯГР), спектроскопічні методи та електронно-спектроскопічний метод для фізико-хімічного аналізу. Подальше використання рН – скляного електроду та використання нових фторидного, натрієвого, калієвого, сульфідного та інших електродів розширило можливості фізико-хімічних методів аналізу. В аналізі органічних сполук різкий скачок отриманий із застосуванням газової та рідинної хроматографії високого тиску, абсорбційної спектроскопії, піролітичної та лазерної мас-спектроскопії тощо.

<sup>4</sup> Праці: див. Араго Ф. Биографии знаменитых астрономов, физиков и геометров / Пер. с фр. – Т. 2. – Санкт-Петербург, 1860; Джау М. История химии / Пер. с ит. – Москва, 1966; Blanc E. et Delhoume L. L'avie étonnante et noble de Gay-Lussac. – Limoges, 1950.

<sup>5</sup> Opere scelte [precedute da un discorso storico-critico d' Icilio Guareschi], Torino, 1911; Fisica de'corpi ponderabili ossia Trattato della costituzione generale dui corpi. – V. 1-4. – Torino. – 1837-1841.

<sup>6</sup> Праці: див. Архангельский П.А. Роберт Бунзен (1811-1899) // Природа. – №1 – 1937; Partington J.R. A history of chemistry. – Vol. 4. – London – New-York. – 1964. – P. 281-293; Кантужанський А.К. Нарушения фотохимического закона взаимозаместимости для фотографических слоев // Успехи физических наук. – 1953. – Т.51. – Вып. 2. – с. 162.

<sup>7</sup> Праці: див. Осинкин А.А. Жизнь и деятельность академика К. Кирхгофа // Труды института истории естествознания и техники АН СССР. История химических наук. – 1960. – Т. 30. – с. 252–287.

<sup>8</sup> Праці: див. Treatise on chemistry – New-York, 1923. – Vol. 1-2; Краткий учебник минеральной и органической химии / Предислов. Д.И. Менделеева. – Санкт-Петербург, 1868.

## Основні фундаментальні фізико-хімічні закони

№ п/п	Назва закону (принципу, начала)		Зміст закону
	Українська	Англійська	
1.	Закони ідеальних газів	Perfect gases laws	Емпіричні правила (принципи), що встановлені для ідеальних газів Бойлем та Маріоттом, Гей-Люссаком, Шарлем, Авогадро, Долтоном. Сукупність цих законів описує всі властивості ідеальних газів. Одним з основних є: $pV=nR_uT$ , де $p$ – абсолютний тиск; $V$ – об'єм; $n$ – кількість газу, моль; $T$ – абсолютна температура; $R_u$ – універсальна газова стала.
2.	Закон Авогадро	Avogadro law	Рівні об'єми різних ідеальних газів за однакових температур і тисків містять однакові числа частинок; молярні об'єми різних ідеальних газів за однакових умов (тиску та температури) є рівними.
3.	Закон Айнштейна	Einstein law	Один квант увібраного світла викликає одну елементарну хімічну реакцію. Це закон еквівалентності, який дозволяє встановити залежність між поглинутою енергією та ступенем перетворення речовини. Оскільки основна елементарна хімічна реакція, що протікає під час поглинання одного кванта світла, часто супроводжується побічними хімічними реакціями з іншими молекулами реакційного середовища (рекомбінації та ін. процесами), звичайно квантовий вихід відрізняється від одиниці.
4.	Закон Бойля-Маріотта	Boyle and Mariotte law	Добуток абсолютного тиску ( $p$ ) і об'єму ( $V$ ) даної маси газу за постійної температури є величиною сталою: $pV=const$ . Цей закон встановлений емпірично.
5.	Закон Бугера-Ламберта-Бера	Lambert Beer law	Під час проходження монохроматичного випромінювання з інтенсивністю ( $I_0$ ) через розчин речовини у неадсорбуючому розчинникові розчинена речовина абсорбує частину світла, пропорційно її концентрації $c$ (моль/л) і товщині абсорбційного шару $h$ (см), при цьому інтенсивність його падає до $I$ . При цьому використовується рівняння: $A = \varepsilon h c$ , де $A$ – оптична густина ( $A=lg I_0/I$ ); $\varepsilon$ – молярний коефіцієнт абсорбції.
6.	Закон (принцип) відповідних станів	Principle of corresponding states	Для реальних газів існує рівняння, яке ідентичне рівнянню стану ідеального газу, сформульоване за допомогою приведеної температури, приведеного тиску й приведеного об'єму: для близьких за природою речовин, якщо значення двох приведених величин для якоїсь речовини або й суміші речовин співпадають, значення третьої приведеної величини теж будуть співпадати.
7.	Закон Гей-Люссака	Gay-Lussac's law	При сталому тискові залежність об'єму ( $V_t$ ) даної маси газу від температури описується співвідношенням: $V_t = V_0 (1+at)$ , або $V_t = V_0 / 273,15 - T$ , де $V_0$ – об'єм газу при даному тискові за температури 273,15 К; $t$ – температура (емпірична) за шкалою Цельсія; $T$ – термодинамічна температура; $a$ – коефіцієнт розширення газу.
8.	Закон Генрі	Henry's law	Маса $m$ газу, розчиненого у рідині даного об'єму, за сталої температури пропорційна парціальному тискові ( $p$ ) цього газу над розчином: $T=K_r p$ , де $K_r$ – константа Генрі, залежна від природи газу й температури.
9.	Закон Гесса	Hess's law	Тепловий ефект хімічної реакції за сталих об'єму або тискові (коли відсутня не пов'язана з розширенням робота) не залежить від шляху хімічної реакції, а лише від початкового й кінцевого станів системи.
10.	Закон Долтона	Dalton's law	Загальний тиск ( $P$ ) суміші газів рівний сумі парціальних тисків ( $p_i$ ) газів компонентів суміші: $P=p_1+p_2+\dots+p_i+\dots+p_n = \sum_{i=1}^n p_i$ .

11.	Закон Джоуля	Joule's law	Величина внутрішньої енергії ідеального газу залежить тільки від температури.
12.	Закон дії мас	Mass action law	1. У хімічній термодинаміці: закон, що пов'язує активності (концентрації) реагентів у стані хімічної рівноваги. Для хімічної реакції: $aA + bB = cC + dD$ ; концентрації реагентів $x$ задовільняють залежність: $[C]^c [D]^d / [A]^a [B]^b = K_c$ , де $a, b, c, d$ – стехіометричні коефіцієнти; $K_c$ – константа хімічної рівноваги. 2. У хімічній кінетиці: закон передбачає, що швидкість елементарної гомогенної хімічної реакції, для якої молекулярність співпадає з порядком реакції, за сталої температури є прямо пропорційною добутковій концентрації реагентів у степенях, рівних стехіометричним коефіцієнтам речовин у рівнянні реакції.
13.	Закон збереження енергії	Energy conservation law	В ізольованій системі сума енергій усіх перетворень, що відбуваються в ній, є сталою, якщо відсутні в системі ядерні реакції, за якими частина маси перетворюється в енергію.
14.	Закон збереження маси	Mass conservation law	У замкненій системі за будь-якого хімічного процесу сума мас реагентів є сталою.
15.	Закон [правило] йонної сили Люїса-Рендалла	Lewis - Randall's ionic strength law [rule]	У розведених розчинах сильних електролітів однакової йонної сили ( $J < 0,02$ ) середній коефіцієнт активності даного електроліту має одне й теж значення, незважаючи на природу розчину.
16.	Закон кінетичний	Rate law	Вираз для швидкості хімічної реакції, в якому є лише концентрації реагентів, сталі швидкості та часткові порядки реакції.
17.	Закон Кірхгофа	Kirchhoff's law	Залежність теплового ефекту хімічної реакції від температури описується різницею сум теплоємностей продуктів реакції і реагентів, тобто різницею теплоємностей кінцевого й початкового станів системи.
18.	Закон Кольрауша незалежного руху йонів	Kohlrausch's law of independent ionic motion	Гранична еквівалентна провідність ( $A_0$ ) електроліту є сумою граничних йонних еквівалентних провідностей аніонів ( $A_{o-}$ ) та катіонів ( $A_{o+}$ ): $A_0 = A_{o-} + A_{o+}$ . У випадку молярної електропровідності: $A_0 = n_1 A_{o-} + n_2 A_{o+}$ , де $n_1$ та $n_2$ – кількості йонів у молекулі.
19.	Закони Коновалова	Konowaloff's laws	Закони, що стосуються рівноваги рідина – газ у системах з необмеженою змішуваністю у рідкій фазі: 1. Газова фаза збагачується тим компонентом, додавання якого до системи викликає збільшення пружності пари над нею (тобто компонентом, що знижує температуру кипіння суміші). 2. Точці максимуму на кривій пружності пари відповідає мінімум на кривій температури кипіння і навпаки. Ці точки є точками азеотропів.
20.	Закон кратних співвідношень	Law of multiple proportions	Якщо два атоми первнів, що реагують між собою, утворюють декілька сполук, то різні масові кількості одного первня, що сполучаються з однією і тією є масовою кількістю другого, відносяться як невеликі цілі числа. Відтак, атоми первнів завше з'єднуються між собою у певних масових кількостях, що відповідають їх еквівалентам. Наприклад, оксиди нітрогену $N_2O$ , $NO$ , $N_2O_3$ , $N_2O_4$ , $N_2O_5$ , у яких масова кількість кисню, з'єданого з однаковою масовою кількістю нітрогену, знаходяться у співвідношенні 1:2:3:4:5.
21.	Закон Кулона	Coulomb law	Сила взаємодії ( $F$ ) двох статичних точкових електричних зарядів ( $q_1$ та $q_2$ ) прямо пропорційна добутковій абсолютних величин їх зарядів та обернено пропорційна квадратові відстані між ними ( $r$ ): $F = q_1 q_2 / 4\pi\epsilon\epsilon_0 r^2$ , де $\epsilon$ – відносна діелектрична проникність середовища; $\epsilon_0$ – діелектрична проникність вакууму.
22.	Начало термодинаміки перше	First law of thermodynamics	У будь-якому процесі приріст внутрішньої енергії ( $\Delta U$ ) закритої системи є рівним сумі енергій, наданих у цій процесі системі у вигляді двох форм – термодинамічної роботи ( $\Delta L$ ) та тепла ( $\Delta Q$ ), тобто: $\Delta U = \Delta L + \Delta Q$ .

23.	Начало термодинаміки друге	Second law of thermodynamics	Неможливим є перехід енергії у формі тепла від тіла менш нагрітого до тіла більш нагрітого (з вищою, ніж попередня, температурою). Математичний опис його ґрунтується на тому, що для кожної ( $n$ -компонентної) фази існує функція стану ( $S$ ) – ентропія фази: $S_i = f(U_i, V_i, b_{1i}, \dots, b_{ni})$ , де $U$ – внутрішня енергія; $V$ – об'єм; $b_1, \dots, b_n$ – кількість молів компонентів фази; $i$ – номер фази системи. Ентропія системи є величиною екстенсивною, тобто ентропія всієї системи є сумою ентропій окремих фаз ( $S_i$ ). При адіабатичних переходах між локальними рівноваговими станами системи виконується принцип зростання ентропії.
24.	Начало термодинаміки третє	Third law of thermodynamics	У рівновагів системі можна відібрати енергію у формі тепла тільки певну кількість енергії, при цьому термодинамічна температура прямує до абсолютного нуля, а ентропія зменшується до певного значення ( $S_0$ ), яке: 1) дорівнює нулю у випадках абсолютно чистих однокомпонентних та впорядкованих багатоконпонентних фаз, які знаходяться у стані рівноваги; 2) є додатним і залежить тільки від числа компонентів у випадку невпорядкованих багатоконпонентних фаз.
25.	Закон об'ємних співвідношень	Law of combining volumes	Об'єми газів реагентів і продуктів реакції за сталої температури та сталої тиску відносяться між собою як невеликі цілі числа.
26.	Закон періодичний первнів	Periodic law	Фізико-хімічні властивості первнів є періодичною функцією їх атомних мас, порядковий номер первня при тому відповідає позитивному зарядові атомного ядра. Всі відомі нині первні вкладаються у 7 періодів, в яких, при їх розташуванні один під одним, утворюються 8 вертикальних груп, що складаються з головних і побічних підгруп: тоді номер групи (за винятком перехідних первнів, лантанідів та актинідів) рівний числу електронів на $s$ - та $p$ - оболонках (для основних підгруп) або на $s$ - та $d$ - оболонках (для побічних підгруп). Формальне представлення періодичної системи первнів може бути різним (на сьогодні відомо, офіційно визнаних, 118 первнів, але найпопулярнішим у хімії є зображення у вигляді скороченої або розгорнутої таблиці).
27.	Закон Рауля	Raoult law	Парціальні тиски ( $p_i$ ) пари кожного з компонентів ідеального розчину за сталої температури є пропорційними до концентрацій цих компонентів у рідкій фазі ( $x_i$ ), виражається в мольних частках: $p_i = p_i^0 x_i$ , де $p_i^0$ – пружність пари чистого розчинника.
28.	Закон розбавлення Оствальда	Ostwald dilution law	Рівняння для сталої електролітичної дисоціації ( $K_c$ ): $K_c = K_c^0 c / (A_0 - A_c)$ , де $A_0$ та $A_c$ – рівновагова провідність електроліту під час безконечного розбавлення та за концентрації ( $c$ ). Закон використовується як наближення під час опису властивостей розбавлених розчинів слабких електролітів.
29.	Закон сталості складу, [сталих співвідношень]	Law of definite proportions	Різні зразки даної індивідуальної речовини, незалежно від їх способу отримання, мають певний постійний склад з однаковим масовим співвідношенням первнів, які входять до її складу.
30.	Закон Стокса	Stokts's law	Довжина хвилі світла флюоресценції більша за довжину хвилі збуджуючого світла: спектр флюоресценції прилягає до спектру вбирання з боку довжин хвиль. У полярних розчинниках ці спектри можуть бути розділені значним інтервалом довжин хвиль.
31.	Закони Фарадея	Faraday's laws	Кількість речовини, що взяла участь у хімічній реакції на електроді, пропорційна кількості електрики, що пройшла по контуру. Кількості різних виділених (чи перетворених) речовин у реакціях на електродах (у випадку протікання рівних кількостей електрики) пропорційні їх електрохімічним еквівалентам $b_e$ : $V = Q b_e / 96500$ , де $Q$ – кількість електрики, що пройшла через систему.

32.	Закони Фіка	Fick's laws	<p>1. У системі з градієнтом концентрацій речовини <math>dC/dx</math> у напрямку <math>x</math> дифузійний потік (<math>J</math>) визначається першим законом Фіка:  <math>J = -DdC/dx</math>,  де <math>D</math> – коефіцієнт дифузії (знак мінус вказує на напрям потоку від більших концентрацій до менших).</p> <p>2. У системі з градієнтом концентрацій речовини <math>dC/dx</math> у напрямку <math>x</math> швидкість зміни концентрації речовини в даній точці, що зумовлена дифузією, визначається другим законом Фіка:  <math>dC/dt = Dd^2C/dx^2</math>,  де <math>t</math> – час.</p>
-----	-------------	-------------	---

Змінюються об'єкти та завдання аналізу. Тому, набувають розвитку загальний, локальний та дистанційний аналізи. Відповідно до фізичних методів аналізу пред'явлено низку вимог про склад та вміст різних речовин:

- точність та надійність інформації;
- оперативність інформації;
- якість аналізів;
- правдивість та відновлюваність результатів аналізу.

Зросли вимоги до термічних характеристик приладів для аналізу, а саме: автоматизації, експресності, дистанційного контролю. Граничні виявлення домішок у речовині кожні  $\sim 10$  років зростає на 2 порядки, наприклад з 1960 до 1970 років – з  $10^{-6}$  до  $10^{-8}$  %, при цьому відносна похибка визначення макрокомпонентів знизилася у 2-5 разів. На сьогодні за багатьма фізичними методами аналізу речовин досягнуті дуже низькі межі виявлення граничної концентрації домішок, наприклад:  $10^{-17}$  кг – у радіоактивному,  $10^{-15}$  кг – в атомно-абсорбційному,  $10^{-16}$  кг – в мас-спектроскопічному методах аналізів. Певні методи вже вичерпали свої можливості з-за:

- непрямого характеру вимірювань, які вимагають калібровки;
- обмеженості застосування;
- зростання величин контролюваних відносних систематичних та неконтрольованих, відносних, випадкових похибок на межі виявлення граничних концентрацій домішок тощо.

## II. Загальна характеристика методів

Спектри випромінювання енергій можна класифікувати за певними ділянками. Межі таких ділянок визначаються можливостями методів їх генерації та можливої реєстрації випромінювання. Взаємодія випромінювання з хімічною системою у кожній ділянці протікає за різними механізмами. Найважливіші атомні та молекулярні переходи, що відповідають наступній послідовності ділянок спектрів є такою:

- X-промінева – K- і L-електронів;
- дальня ультрафіолетова – середні електрони;
- ближня ультрафіолетова – валентні електрони;
- видима – валентні електрони;
- ближня і середня інфрачервона – молекулярні коливання;

- дальня інфрачервона – молекулярні обертавання і низькочастотні коливання;
- мікрохвильова – молекулярні обертавання;
- радіохвильова – ядерний магнітний резонанс тощо.

## III. Розділи фізичних методів дослідження речовин

### I. Термічний аналіз.

#### 1.1. Основні означення.

**1.2. Диференціальний термічний аналіз (ДТА).** Суть методу. Термічні криві «час-температура»: прямий і диференціальний запис. Прилади, що застосовують у ДТА. Термопар. Схеми простої та диференціальної термопар. Комбінована термопара. Матеріали для термопар. Дзеркальні гальванометри. Характеристики пірметрів. Тиглі. Зразок та еталон. Теоретично можливі криві топлення та твердіння зразка. Приклади термограм утворення та розкладу твердих розчинів та хімічних сполук. Діаграми стану подвійних та потрійних конденсованих систем у координатах «температура – час».

**1.3. Термогравіметричний аналіз (ТГА).** Ізо-термічний гравіметричний аналіз (ІТГА). Динамічний термогравіметричний аналіз (ДТГА). Характеристичні точки термогравіметричної кривої. Загальні закономірності термічного розкладу речовини. Механізми і кінетика термічного розкладу речовини.

#### 1.4. Термоволюметричний аналіз.

### II. Методи мас-спектроскопії.

**2.1. Основні принципи мас-спектроскопії.** Процеси йонізації. Утворення мас-спектру. Йонізація атомів і молекул. Процес йонізації і типи йонів. Методи йонізації. Джерело йонів. Мас-аналізатор. Реєструючий пристрій (детектор йонного струму). Система введення речовини, яка аналізується, в йонне джерело. Явище сорбції та «пам'яті» в мас-спектрометрі.

**2.2. Принципові схеми мас-спектрометрів.** Магнітний мас-спектрометр. Динамічні мас-спектрометри. Спектрометр йон-циклотронного резонансу. Аналітичне застосування електронів низької енергії.

**2.3. Вакуум.** Фізичний вакуум. Вакууметрія. Вакуумна техніка. Вакуумна система мас-спектрометра. Вакуумна арматура. Вакуумні помпи: механічні, струменні, сорбційні, йонні, конденсаційні

(кріогенні). Ділянки вакууму та дії різних вакуумних pomp. Вакуумні оливи. Вакуумні матеріали.

**2.4. Обладнання для мас-спектрометрії.** Мас-спектрометри з простим фокусуванням. Методи введення зразків, які застосовуються в мас-спектрометрії. Мас-спектрометри високого розв'язання. Квадрупольні мас-спектрометри.

**2.5. Апаратура і методика піролітичної мас-спектрометрії.** Піролізна комірка. Введення продуктів деструкції в мас-спектрометр. Електронударна піролітична мас-спектрометрія. Йонізація в електричному полі. Лазерна піролітична мас-спектрометрія. Атомно-йонна мас-спектрометрія. Поєднання піролітичної газової хроматографії з мас-спектрометрією. Мас-спектрометрія з електрогідродинамічною йонізацією.

**2.6. Методи аналізу даних піролітичної мас-спектрометрії.** Отримання та використання мас-термограм. Визначення кінетичних характеристик. Встановлення структури продуктів деструкції за мас-спектрами.

**2.7. Застосування мас-спектрометрії.** Ідентифікація та встановлення будови речовин. Визначення потенціалів йонізації молекул та появи йонів. Мас-спектральні термодинамічні дослідження. Мас-спектрометрія в хімічній кінетиці.

**2.8. Застосування мас-спектрометрії для характеристики та аналізу органічних речовин.**

2.8.1. Якісний аналіз, ідентифікація та встановлення структури органічних сполук.

2.8.2. Кількісний аналіз. Кількісний аналіз продуктів деструкції високомолекулярних сполук.

2.8.3. Мас-спектри вуглеводнів, спиртів, оксигенвмісних сполук, галогенвмісних сполук, сульфурвмісних сполук, нітрогенвмісних сполук, силіційвмісних та інших сполук.

**III. Методи визначення електричних дипольних моментів молекул.**

**3.1. Теоретичні основи методів.** Електричний дипольний момент молекули. Енергія молекули в зовнішньому електричному полі. Орієнтаційна поляризація молекул. Ефект Штарка і квантомеханічний підхід до виведення орієнтаційної поляризації молекул. Діелектрик в електричному полі.

**3.2. Експериментальні методики** та застосування даних за електричними дипольними моментами в хімії. Перший метод Дебая – визначення електричного дипольного моменту пари речовин. Другий метод Дебая – визначення електричних дипольних моментів молекул речовин у розбавлених розчинах. Відхилення молекулярного пучка в неоднорідному електричному полі. Метод електричного резонансу. Використання даних за дипольними моментами в хімії.

**IV. Методи визначення геометричної будови молекул.**

**4.1. Мікрохвильовий метод** дослідження оберտальних спектрів молекул. Обертальні спектри поглинання молекул. Методика експерименту в мікрохвильовій оберտальній спектроскопії. Методи

розрахунку геометричних параметрів молекул. Визначення електричних дипольних моментів молекул. Дослідження внутрішнього оберտання та інверсії молекул. Деякі результати мікрохвильових досліджень.

**4.2. Чисто оберտальні спектри** комбінаційного розсіяння (КР). Теоретичні основи методу. Методика експерименту оберտальної спектроскопії КР. Визначення геометрії молекул.

**4.3. Метод газової електронографії.**

4.3.1. Розсіяння електронів атомами. Пружне розсіяння електронів атомами. Непружне розсіяння електронів атомами. Повна інтенсивність атомного розсіяння.

4.3.2. Розсіяння електронів молекулами. Молекулярна складова інтенсивності розсіяння. Перетворення Фур'є в газовій електронографії. Двоатомні молекули. Принципова схема електронографа. Мікрофотометрування. Виділення молекулярної складової інтенсивності розсіяння.

4.3.3. Розшифрування електронограм. Вплив внутрімолекулярних коливань на конфігурацію молекул, яку визначають методом газової електронографії. Можливості методу газової електронографії. Визначення геометрії молекул при сумісному використанні електронографічних та спектроскопічних даних. Деякі стереохімічні результати електронно-графічних досліджень.

**V. Методи коливальної спектроскопії. Методи інфрачервоної (ІЧ) спектроскопії та спектроскопії комбінаційного розсіяння (КР) світла.**

**5.1. Теоретичні основи коливальної спектроскопії.** Квантомеханічне представлення коливальних спектрів. Основи класичної теорії коливальних спектрів. Практичний розрахунок коливальних спектрів.

**5.2. Симетрія молекул і нормальних коливань.** Загальні уявлення про симетрію молекул. Якісні уявлення про симетрію коливань. Результати теоретико-групового аналізу коливань. Резонанс Фермі. Ефекти кристалічності.

**5.3. Аналіз та інтерпретація спектрів.** Визначення симетрії і структури молекул. Висліди із співставлення ІЧ та КР спектрів. Поляризація смуг у спектрах КР. Контури оберտальної структури смуг. Групові або характеристичні частоти. Ізотопні ефекти.

**5.4. Інше застосування коливальних спектрів.** Визначення силових полів молекул. Кореляція силових сталих молекул з іншими властивостями. Крутильні коливання та потенціальні перешкоди внутрішнього оберտання. Використання фундаментальних частот для розрахунку коливальних вкладів у термодинамічні функції. Ідентифікація сполуки та якісний аналіз сумішей. Кількісний аналіз. Дослідження рівноваг. Комплекси з водневими зв'язками. Кінетичні дослідження. Коливальна спектроскопія високомолекулярних сполук.

## 5.5. Прилади та експериментальна техніка.

### 5.5.1. Техніка і методики ІЧ-спектроскопії.

Принципи будови та дії ІЧ-спектрометрів. Двопроменевий спектрометр. Оптичні матеріали для ІЧ-спектроскопії. Поводження з оптичними матеріалами, які використовуються в ІЧ-спектроскопії, та їх зберігання. Підготовка зразків різного типу. Методика приготування зразків: тверді полімери, ізотропні плівки, орієнтовані плівки. Вирізання полімерних зразків. Видалення із спектрів плівкових зразків інтерференційних смуг. Зменшення розсіяння від поверхні зразків. Приготування зразків полімерних гелів для спектроскопічних досліджень. Приготування волокон для спектроскопічних досліджень. Мікроспектроскопія окремих волокон. Спектроскопія пучків волокон. Рідкі полімери. Розчини. Багатопробні кювети. Додаткові прилади. Дослідження зразків спеціального призначення. Якісний аналіз в ІЧ-спектроскопії. Визначення ступеня кристалічності полімерів методом інфрачервоної спектроскопії. Інфрачервона спектроскопія поверхні полімерних кристалів. Вимірювання мікродзеркального відбивання. Спектроскопія внутрішнього відбивання. Інфрачервона відбивально-абсорбційна спектроскопія. Інфрачервона фур'є-спектроскопія. Ближня інфрачервона спектроскопія. Дальня інфрачервона спектроскопія.

5.5.2. Порушене повне внутрішнє відбивання.

5.5.3. Техніка спектроскопії КР. Спектральна апаратура та зразки. Резонансне та інверсійне КР. Методи нелінійної спектроскопії КР.

**5.6. Коливання карбон-карбонових та карбон-гідрогенових зв'язків:** валентних, деформаційних та карбонового ланцюга алканів, алкенів, алкінів та алленів, ароматичних сполук.

**5.7. Коливання карбон-оксигенових та оксиген-гідрогенових зв'язків:** валентних, міжмолекулярних, внутрішньомолекулярних та деформаційних зв'язків спиртів, фенолів, етерів, пероксидів, галогенвмісних сполук, карбонатів, альдегідів, кетонів, карбонових кислот, естерів.

**5.8. Коливання карбон-нітрогенних та нітроген-гідрогенових зв'язків:** валентних та деформаційних коливань амідів, білків та поліпептидів, аміно- та амідокислот, амінів, гетероциклічних ароматичних сполук.

**5.9. Коливання між елементами структури зв'язків сполук, що містять Фосфор, Галогени, Силіцій, Сульфур та інші елементи.**

**VI. Методи електронної ультрафіолетової (УФ) та видимої спектроскопії.**

**6.1. Основи теорії електронних спектрів молекул.** Загальна характеристика властивостей електронних станів. Номенклатура і символіка електронних станів. Класифікація електронних переходів, їх відносне положення. Правила відбору та інтенсивність переходів.

**6.2. Застосування електронних спектрів.** Структурно-спектральні кореляції: органічні сполуки, неорганічні і комплексні сполуки. Аналітич-

ні застосування: якісний аналіз та ідентифікація речовин, кількісний аналіз.

**6.3. Техніка, прилади, методики електронної спектроскопії.** Апаратура абсорбційної спектроскопії. Прилади для електронної спектроскопії. Двопроменевий спектрометр. Кювети для зразків та кювети порівняння. Кювети високого тиску для оптичних досліджень. Розчинники для ультрафіолетової спектроскопії. Підготовка зразків. Спектроскопія з диференціюванням, спектроскопія різниці (відмінності) та двохвильова спектроскопія. Спектри люмінесценції: теоретичні основи, практичне застосування та техніка люмінесцентної спектроскопії.

## VII. Емісійна спектроскопія.

### 7.1. Ексимери та ексиплекси.

**7.2. Флуоресценція.** Прилади для флуоресцентної спектроскопії: флуоресцентні спектрофотометри. Методи вимірювання тривалості флуоресценції. Метод рахунку окремих фотонів. Осцилографічний імпульсний метод. Метод, пов'язаний із зсувом фаз.

**7.3. Поляризована флуоресценція.** Вивчення молекулярної рухливості флуоресцентним методом.

**7.4. Фосфоресценція.** Прилади для фосфоресцентної спектроскопії: фосфоресцентні спектрофотометри. Вимірювання тривалості фосфоресценції.

### 7.5. Імпульсна кінетична спектроскопія.

### 7.6. Наносекундна імпульсна спектроскопія.

### 7.7. Хемілюмінесценція і термолюмінесценція.

**7.8. Застосування емісійної спектроскопії для дослідження полімерів.**

## VIII. Аналіз нейтронного розсіяння.

### 8.1. Властивості нейтронів.

**8.2. Прилади для аналізу нейтронного розсіяння:** джерела нейтронів, спектрометри розсіяння нейтронів. Детектори нейтронів. Приготування зразків.

**8.3. Застосування аналізу нейтронного розсіяння для вивчення структури полімерів.**

## IX. Аналіз анігіляції позитронів.

### 9.1. Властивості позитронів.

### 9.2. Експериментальні методи.

**9.3. Прилади для аналізу анігіляції позитронів:** джерела позитронів, гамма-сцинтиляційні лічильники. Система вимірювання часу життя позитрона. Приготування зразків.

**9.4. Застосування аналізу анігіляції позитронів для дослідження структури полімерів.**

**X. Методи X-променевої і фотоелектронної спектроскопії.**

**10.1. Фізичні основи методів та експериментальна техніка.**

### 10.1.1. Загальні принципи.

10.1.2. Параметри і структура фотоелектронних спектрів. Хімічний зсув. Спін-орбітальний зв'язок у молекулах та деякі інші ефекти. Коливальна структура фотоелектронних спектрів. Інтенсивність фотоелектронних піків. Глибина виходу фотоелектронів.



10.1.3. Техніка і методика експерименту. Апаратура. Стандарти для обліку зарядки зразків і калібрування спектрометрів. Комплексні установки та методики. X-променевофлуоресцентні спектрометри.

## 10.2. Застосування методів фотоелектронної спектроскопії в хімії.

10.2.1. Структурно-аналітичне застосування. Елементний аналіз та ідентифікація сполук. Структурна інформація. Кількісний аналіз.

10.2.2. Теоретичне моделювання та пояснення хімічних зсувів.

10.2.3. Деякі закономірності та кореляції хімічних зсувів. Зв'язок із ефективним зарядом та ступенем окиснення. Адитивність хімічних зсувів. Кореляція хімічних зсувів з даними інших методів.

10.2.4. Адсорбція, каталіз та інші галузі застосування.

## XI. Методи ядерного магнітного та парамагнітного резонансу.

**11.1. Основи ядерного магнітного резонансу (ЯМР).** Основи фізичної теорії спектроскопії ЯМР. Ядерний спіні. Система координат, що обертається (СКО). Імпульсне збудження ядерних спінів. Частотне і часове представлення сигналу ЯМР. Позарезонансні ефекти. Параметри спектрів ЯМР. Хімічні зсуви. Спін-спінова взаємодія (ССВ). Хімічний зсув і спіні-спінова взаємодія. Екранування ядер електронами, хімічні зсуви сигналів ЯМР. Спін-спінова взаємодія і мультиплетність спектрів ЯМР. Інтенсивність сигналів. Поведінка в СКО хімічних зсувів та розщеплень. Імпульсні послідовності. Релаксація спінів. Спін-спінова взаємодія з квадрупольним ядром. Методи розв'язки (декаплінгу) ядерних спінів. Фізичні основи декаплінгу. Гомоядерний декаплінг. Зсуви Блоха-Сігерта. Ядерний ефект Овергавзера (ЯЕО). Стаціонарні ЯЕО. ЯЕО у двоспіновій системі. ЯЕО і молекулярний рух. ЯЕО і відстані між спінами. Гетероядерні ЯЕО. ЯЕО в багато спінових системах. Додаткові шляхи релаксації. Визначення міжспінових відстаней. Непрямі ефекти і дифузія спінів. Перенесення насичення. Перенесення поляризації. Дія імпульсних градієнтів поля на поперечну намагніченість.

Фізичні принципи методу. Магнітний момент ядра та його взаємодія з магнітним полем. Умови ядерного магнітного резонансу. Реалізація умов магнітного резонансу.

### 11.2. Застосування і техніка експерименту.

11.2.1. Застосування в структурних дослідженнях.

11.2.2. Фізико-хімічні застосування.

11.2.3. Динамічний ЯМР.

11.2.4. Техніка і методика експерименту. Спектрометри ЯМР.

11.2.4.1. Спектрометр ЯМР. Імпульсне збудження. Детектування сигналу. Відбір точок спаду вільної індукції (СВІ). Квадратурне детектування. Фазові цикли, селекція сигналів. Згладжувальні функції (функції аподизації). Фазова корекція.

Підготовка зразка. Підготовка спектрометра. Калібрування спектрометра.

11.2.4.2. Спектр ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$ . Кореляції будови структурних фрагментів молекул з хімічними зсувами в спектрах на ядрах  $^1\text{H}$ . Кореляції структурних фрагментів з виглядом сигналів у спектрах ПМР. Аналіз спектру чистої сполуки з неспівпадаючими сигналами. Аналіз спектру сполуки, що містить домішки. Аналіз складних спектрів ПМР. Знаходження спектральних параметрів. Зв'язок величин константи спіні-спінової взаємодії (КССВ) на ядрах  $^1\text{H}$  зі структурою хімічних сполук. Кореляції хімічних зсувів ядер  $^{13}\text{C}$  зі структурою молекули. Константи спіні-спінової взаємодії ядер  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$ . Адитивні схеми обчислення хімічних зсувів ядер  $^{13}\text{C}$ . Аналіз вуглецевого спектру сполуки. Основні закономірності спектрів  $^{19}\text{F}$ . Програми обробки спектрів. Динамічні ефекти в ЯМР.

11.2.4.3. Одномірні методики ЯМР. Оптимізація одноімпульсного експерименту. Вимірювання спектрів ядерного ефекту Овергавзера. Кількісне вимірювання ЯЕО. Застосування спектрів ЯЕО. Використання ароматичних розчинників для спрощення спектру ЯМР. Придушення сигналу розчинника. Гетероядерний декаплінг. Редагування спектрів  $^{13}\text{C}$  за допомогою спінової луни. Визначення квадрупольних ядер.

11.2.4.4. Двомірна спектроскопія ЯМР. Подвійний резонанс. Зразки, розчинники, стандарти. Генерація двомірних спектрів. Вступ до двомірних методик. Генерація другого виміру. Методи графічного подання двомірних спектрів. Тонка структура піків. Інтерпретація структури мультиплетів. Ускладнення, що виникають при інтерпретації спектрів.

### 11.3. Спектроскопія електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).

11.3.1. Теоретичні основи методу: умови ЕПР. Положення резонансного сигналу та g-фактор. Електрон-ядерна взаємодія і тонка структура спектрів ЕПР анізотропних систем. Інтенсивність, ширина і форма лінії.

11.3.2. Додатки спектроскопії ЕПР. Структурні дослідження. Кінетичні та інші дослідження.

11.3.3. Техніка та експериментальні методики спектроскопії ЕПР. Загальні відомості. Методи подвійного резонансу. Хімічна поляризація ядер та електронів.

## XII. Методи ядерного квадрупольного резонансу та ядерного гамма-резонансу.

### 12.1. Ядерний квадрупольний резонанс (ЯКР).

12.1.1. Основи теорії. Загальні відомості. Електростатична взаємодія квадрупольного ядра з електричним полем. Квадрупольні рівні енергії та переходи. Інтенсивність, ширина і мультиплетність сигналу.

12.1.2. Додатки та інтерпретація спектрів ЯКР. Частоти ЯКР. Структурні додатки. Інтерпретація градієнту неоднорідного електричного поля на ядрі. Кореляції спектральних параметрів ЯКР з іншими фізико-хімічними характеристиками.

12.1.3. Техніка і методи експерименту.

## **12.2. Мессбауерівська та імпедансна спектроскопія.**

12.2.1. Загальна характеристика і теоретичні основи методу.

12.2.2. Параметри мессбауерівських спектрів. Ізомерний (хімічний) зсув. Квадрупольне розщеплення. Надтонка структура магнітних взаємодій.

12.2.3. Застосування в хімії. Емпіричні кореляції і структурні дослідження. Динамічні ефекти.

12.2.4. Техніка і методи експерименту.

## **XIII. Методи дослідження оптично-активних речовин.**

### **13.1. Оптичні методи.**

13.1.1. Властивості електромагнітного випромінювання.

13.1.2. Спектроскопічні методи для дослідження полімерів. Абсорбційна спектроскопія.

13.1.3. Неспектроскопічні оптичні методи дослідження полімерів. Поляризоване випромінювання.

13.1.4. Оптичні матеріали.

13.1.5. Джерела світла. Дейтерієві джерела світла. Жарівки на інертному газі. Ртутні дугові жарівки.

13.1.6. Лазери. Гелієво-неоновий лазер. Аргонний йонний лазер. Рубіновий лазер. Лазери на органічних барвниках.

13.1.7. Оптичні детектори. Фотопровідні і фотоелектричні детектори. Теплові детектори. Фотоплівка.

### **13.2. Показник заломлення.**

13.2.1. Визначення інкременту показника заломлення.

13.2.2. Автоматичний диференціальний рефрактометр.

13.2.3. Визначення питомого об'єму розчиненої речовини за показником заломлення розчину.

**13.3. Дисперсія оптичного обертання (ДОО).** Лінійно поляризоване випромінювання. Кругова поляризація світла. Квантомеханічний розгляд оптичної активності та спіральна модель молекули. Симетрія молекул та оптична активність. Криві ДОО. Ефект Коттона. Принципова схема експерименту.

**13.4. Круговий дихроїзм (КД).** Поглинання променів з різною круговою поляризацією. Зв'язок кругового дихроїзму та обертальної сили переходу. Схема експерименту. Формування променів з круговою поляризацією.

**13.5. Застосування спектрополяриметрії в хімії.** Загальні питання застосування методів ДОО та КД. Емпіричні закономірності. Правила Брюстера та октантів.

## **XIV. Світлорозсіяння.**

**14.1. Ширококутове розсіяння світла.** Розсіяння маленькими частинками у розчині. Визначення молекулярної маси маленьких часточок методом світлорозсіяння. Розсіяння розчинами макромолекул. Визначення середньомасової молекулярної маси методом світлорозсіяння. Метод асимет-

рії. Метод Зімма. Визначення другого віріального коефіцієнта методом світлорозсіяння. Визначення середньоквадратичної відстані між кінцями полімерного ланцюга методом світлорозсіяння. Прилади для вимірювання світлорозсіяння. Приготування зразків для вимірювання розсіяння світла. Застосування світлорозсіяння для дослідження полімерів.

**14.2. Імпульсно-індуковане критичне розсіяння.**

**14.3. Малокутове лазерне світлорозсіяння.**

**14.4. Спектроскопія відбиття світла.**

**14.5. Спектроскопія Релея-Бріллюена.** Інтерферометри Фабрі-Перо.

**XV. Методи вивчення поляризованості та магнітної оптичної активності.**

**15.1. Релєвське розсіяння світла.** Релєвське розсіяння світла в газах та розчинах. Схема та умови експерименту.

**15.2. Ефект Керра.** Закон Керра. Методика експерименту. Теорія ефекту Керра. Застосування методу релєвського розсіяння світла та ефекту Керра: визначення головних значень еліпсоїда поляризованості молекул; визначення головних значень еліпсоїда поляризованості хімічного зв'язку і групи атомів; вивчення конформацій і внутрішнього обертання молекул.

**XVI. Ефект Фарадея.**

**16.1. Явище Фарадея.** Схема експерименту.

**16.2. Теорія ефекту.** Зв'язок з ефектом Зеємана.

**16.3. Магнітний круговий дихроїзм (МКД) і дисперсія магнітного оптичного обертання (ДМОО).**

**16.4. Застосування ефекту Фарадея в хімії.** Адитивні властивості сталої Вердє. Вивчення електронних переходів у комплексних сполуках за допомогою МКД. Аналітичне застосування ефекту Фарадея.

**XVII. Аномальне розсіяння X-променів. Метод визначення абсолютної конфігурації.**

**17.1. Абсолютна конфігурація молекул у декартовій системі координат.**

**17.2. Нормальне розсіяння і закон Фріделя.**

**17.3. Розсіяння X-променів у ділянці поглинання атома.**

**17.4. Аномальне розсіяння та визначення абсолютної конфігурації молекул.**

**XVIII. Метод гамма-спектроскопії.**

Метод гамма-спектроскопії. Фізична суть методу. Джерела гамма-випромінювання. Характеристика гамма-випромінювання. Гамма-радіоактивні ізотопи. Характеристика сцинтиляційного гамма-спектрометра. Підготовка проб до аналізу. Омолітний апарат оцінки результатів. Чутливість та відтворюваність результатів. Різновидності гамма-спектроскопії. Обмеження методу. Галузі використання методу.

**XIX. Метод нейтронно-активаційного аналізу.**

Метод нейтронно-активаційного аналізу. Фі-

зична суть нейтронної активації. Основний принцип методу. Розрахунок числа радіоактивних атомів. Основні стадії методу. Чутливість методу. Лабораторне обладнання. Принцип будови ядерних (атомних) реакторів. Будова реактора ИР-100. Характеристика нейтронних потоків. Експериментальні канали. Геометрія зразків для дослідження. Система обчислення гамма-спектрів досліджуваних речовин. Підготовка проб до аналізу. Структура програмного пакету. Аналітична система LABSOCS та її переваги. Фізичні та хімічні обмеження нейтронно-активаційного аналізу. Застосування нейтронно-активаційного аналізу.

#### **XX. Методи атомної емісійної спектроскопії.**

Методи атомної емісійної спектроскопії. Фізична суть емісійних процесів. Види спектроско-

пії: атомна, ядерна, суб'ядерна. Прикладні аспекти аналізу: лазерна, ядерна (атомна) енергетика. Атомна емісійна спектроскопія з індуктивно зв'язаною аргонною плазмою. Склад плазми та особливості її використання в аналітичній хімії. Атомний емісійний спектрометр Плазмоквант PQ-110. Будова спектрометра. Основні модулі структури PQ-110. ІСП-модуль. Спектрометр, система управління приладом. Допоміжні модулі: система охолодження, гідридна система. Система автоматичної подачі проб. Програмне забезпечення для управління і обробки результатів дослідження. Основні ознаки і переваги пакету програм. Чутливість, точність та відтворюваність результатів. Основні галузі застосування атомно-емісійних спектрометрів.

### **Література**

1. Н.Н. Роева, В.С. Кузько, Г.Р. Касьяненко, В.К. Кирничная, Аналитическая химия и физико-химические методы анализа: Учебно-практическое пособие (МГУТУ, Москва, 2004).
2. В. Бажант, В. Хваловски, И. Ратоуски, Силиконы (Госхимиздат, Москва, 1960).
3. Д. Браунд, А. Флойд, М. Сейнзбери, Спектроскопия органических веществ (Мир, Москва, 1992).
4. Дж. Бранд, Г. Эглингтон, Применение спектроскопии в органической химии (Мир, Москва, 1967).
5. Л. Беллами, ИК-спектры сложных молекул (Литиздат, Москва, 1963).
6. Л. Беллами, Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул (Мир, Москва, 1971).
7. Н.Г. Бахшиев, Введение в молекулярную спектроскопию (Химия, Ленинград, 1987).
8. А. Вайсберг, Установление структуры органических соединений химическими методами: книга I (Химия, Москва, 1967).
9. А. Вайсберг, Установление структуры органических соединений химическими методами: книга II (Химия, Москва, 1967).
10. Л.А. Вайнштейн, Атомная спектроскопия (спектры атомов и ионов): Учебное пособие (МФТИ, Москва, 1991).
11. В.П. Васильев, Л.А. Кочергина, Т.Д. Орлова, Аналитическая химия (Дрофа, Москва, 2003).
12. В.П. Васильев, Аналитическая химия. Часть 2. Физико-химические методы анализа: Учебник (Высшая школа, Москва, 1989).
13. Вимоги щодо безперервності контролю-вимірювального та лабораторного електричного устаткування. Частина 2-020 (Держстандарт України, Київ, 2007).
14. М.В. Волкешштейн, Л.А. Глибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов, Колебания молекул (Наука, Москва, 1972).
15. Л.А. Грибов, Введение в молекулярную спектроскопию (Наука, Москва, 1976).
16. Ю.П. Дорминдонтов, Методы УФ, ИК и ЯМР спектроскопии и их применение в органической химии: Учебное пособие (Пермь, 2001).
17. Е.Н. Дорохова, Г.В. Прохорова, Аналитическая химия. Физико-химические методы анализа (Высшая школа, Москва, 1981).
18. Р. Драго, Физические методы в химии. В 2-х том (Мир, Москва, 1981).
19. В.А. Дроздов, В.В. Кузнецов, С.Л. Рогатинская, Введение в физико-химические методы анализа: Учебное пособие (МХТИ им. Менделеева, РХТУ, Москва, 1980).
20. И. Дехант, Р. Данц, В. Киммер, Р. Шмольке, Инфракрасная спектроскопия полимеров (Химия, Москва, 1976).
21. В.К. Зінчук, Г.Д. Левицька, Л.О. Дубенська, Фізико-хімічні методи аналізу: Навчальний посібник (Видав. центр ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2008).
22. Г.С. Попова, Л.И. Таратина, Л.Н. Пирожная и др., Инфракрасные спектры поглощения полимеров и вспомогательных веществ (Химия, Ленинград, 1969).
23. А.В. Василюев, Е.В. Гриненко, А.О. Щукин, Т.Г. Федуллина, Инфракрасная спектроскопия органических и природных соединений: Учеб. Пособие (СПбГЛТА, Санкт-Петербург, 2007).
24. Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин, Физические методы определения строения органических соединений: Учебн. Пособие (Высш. школа, Москва, 1984).
25. Л.А. Казицына, Н.Б. Куплетская, Применение УФ-, ИК- и ЯМР- спектроскопии в органической химии: Учеб. Пособие (Высш. Школа, Москва, 1971).

26. Х. Хэллэм, Дж. Тернер, И. Битта и др., Колебательная спектроскопия: Современные воззрения. Тенденции развития (Мир, Москва, 1981).
27. А.П. Крешков, Основы аналитической химии, том 3, Физико-химические (инструментальные) методы анализа (Химия, Москва, 1970).
28. А. Кросс, Введение в практическую инфракрасную спектроскопию (ИЛ, Москва, 1961).
29. Ю.О. Ластухін, С.А. Воронов, Органічна хімія: Підручник (Центр Європи, Львів, 2001).
30. Б.Л. Литвин, Фізичні методи дослідження будови органічних речовин: методичний посібник (Прикарпатський національний університет ім. В. Стефаника, Івано-Франківськ, 2009).
31. Б.Л. Литвин, А.Л. Романюк, Фізичні методи дослідження органічних речовин: Методичний посібник (Прикарп. національний ун-т ім. В. Стефаника, Івано-Франківськ, 2003).
32. Н.П. Максютіна, Ф.Е. Каган, Ф.А. Митченко и др., Методы идентификации лекарственных препаратов (Химия, Москва, 1985).
33. Мала гірнича енциклопедія. В 3-х том. За ред. В.С. Білецького (Донбас, Донецьк, 2004).
34. Л.С. Маянц, Б.С. Алербух, Теория и расчет интенсивностей в колебательных спектрах молекул (Наука, Москва, 1971).
35. О.М. Мельниченко, В.Г. Герасименко, В.С. Бітюцький, Н.В. Соболева, Аграрні вісті, (2-3), 34 (2008).
36. К. Наканиси, Инфракрасные спектры и строение органических соединений (Мир, Москва, 1965).
37. К. Накомото, Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений (Мир, Москва, 1966).
38. К. Накомото, ИК и КР спектры неорганических и координационных соединений: Монография (Мир, Москва, 1991).
39. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков, Физические методы исследования в химии: Учебник (Мир, Москва, 2003).
40. Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина, Основы молекулярной спектроскопии: Учебном пособи (Мир, Москва, 2008).
41. Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Афвольтер, Определение строения органических соединений (Мир, Москва, 2006).
42. Г.Н. Семенович, Т.С. Храмова, ИК и ЯМР-спектроскопия полимеров. Справочник по физической химии полимеров (Киев, 1985).
43. Д. Кендал, Прикладная инфракрасная спектроскопия (Мир, Москва, 1970).
44. А. Финч, П. Гейтс, К. Редклиф, Ф. Диксон и др., Примененние длинноволновой ИК-спектроскопии в химии (Мир, Москва, 1973).
45. Р. Сильверстейн, Г. Басслер, Т. Моррил, Спектрометрическая идентификация органических соединений (Мир, Москва, 1977).
46. А. Смит, Прикладная ИК-спектроскопия (Мир, Москва, 1982).
47. В.А. Соболев, В.А. Тертых, Ж. Практ. Спектры, 10, 928 (1969).
48. Л.И. Таругина, Р.Ф. Позднякова, Спектральный анализ полимеров (Ленинград, 1986).
49. Н.А. Чумаевский, Колебальные спектры элементоорганических соединений элементов IVБ и VB групп. Монография (Наука, Москва, 1971).
50. А.К. Бабко, А.Т. Пилипенко, И.В. Пятницкий, О.П. Рябушко, Физико-химические методы анализа (Высш. школа, Москва, 1968).
51. Г.В. Юхневич, Инфракрасная спектроскопия воды: Монография (Наука, Москва, 1973).

**Сіренко Геннадій Олександрович** – заслужений діяч науки і техніки України, доктор технічних наук, професор, академік Академії технологічних наук України, професор кафедри неорганічної та фізичної хімії.

**Мартинюк Марія Іванівна** – аспірант кафедри неорганічної та фізичної хімії.

**Солтис Любов Михайлівна** – кандидат хімічних наук, член-кореспондент Академії технологічних наук України, викладач кафедри неорганічної та фізичної хімії.