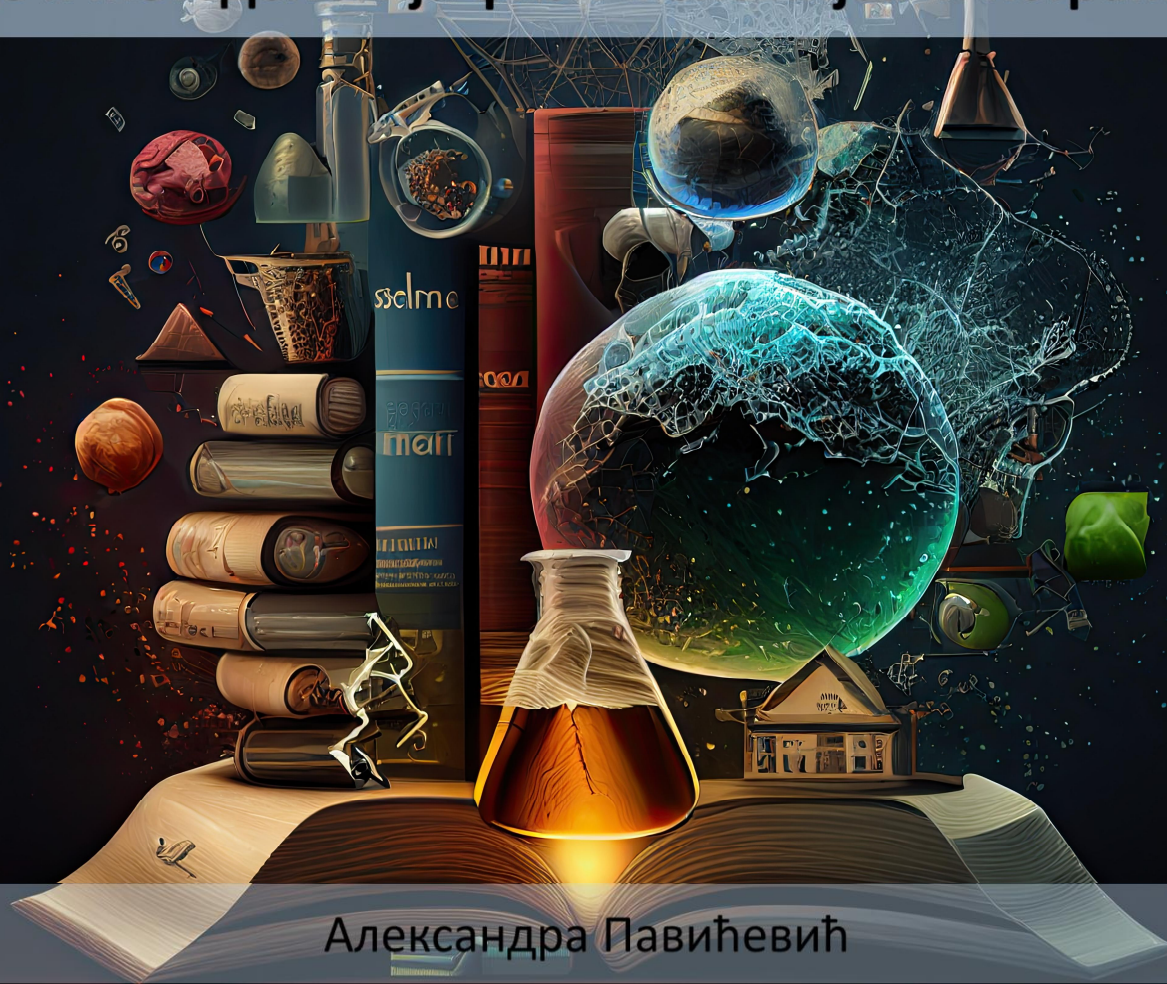


ФАКУЛТЕТ ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

Методе и методологија физичкохемијских истраживања



Александра Павићевић

Подсетник други пут - важно
обавештење!!!

Изборни предмет

„Биофизичка хемија - теоријски и експериментални
приступ“ - предавања петком у 18 ч, библиотека ФФХ.

ПРВО ПРЕДАВАЊЕ: 3.11.2023.



Садржај

- Научни метод и методе научног истраживања - разлике
- Методе, технике, процедуре и протоколи
- Методологија - елементи, гране, квалитети
- Физичка хемија - дефиниција, дисциплине и методе
- Процес физичкохемијског истраживања
- Литература



Метод - подсећање

Метод - сваки поступак и пут у решавању неког питања или проблема, односно начин рада неопходан за постизање одређеног циља.

То је начин мишљења и истраживања у науци, начин испитивања, начин рада, а заснива се на објективности, рационалности, прецизности, поузданости и проверљивости.



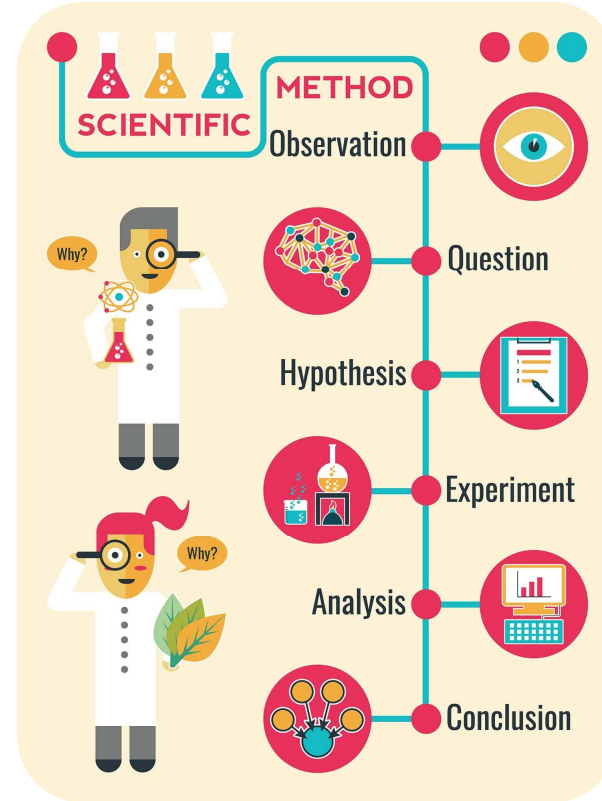
Научни метод vs. методе научног истраживања

Метод обухвата три основне компоненте:

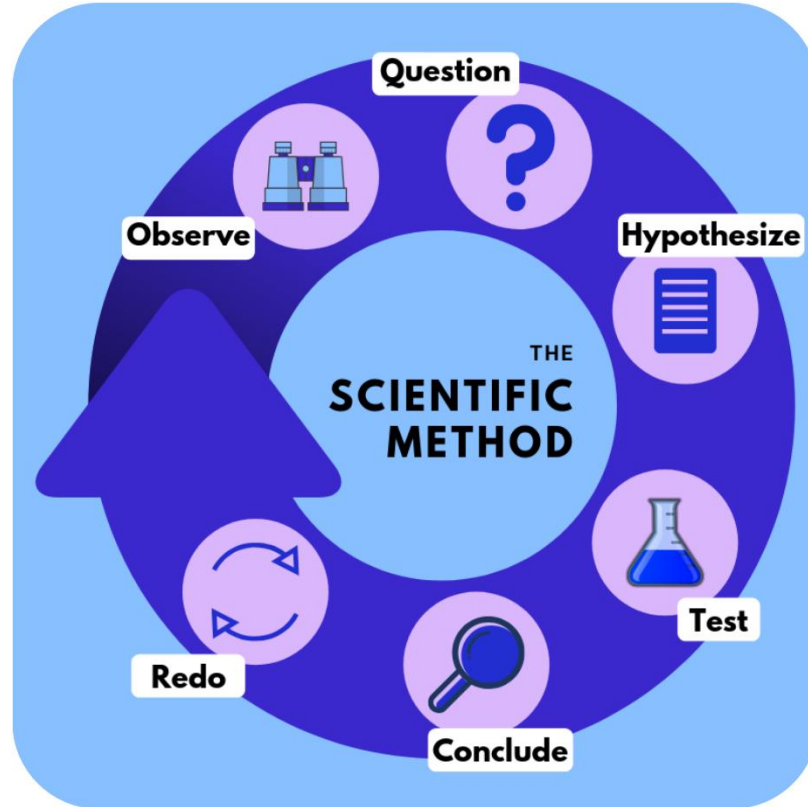
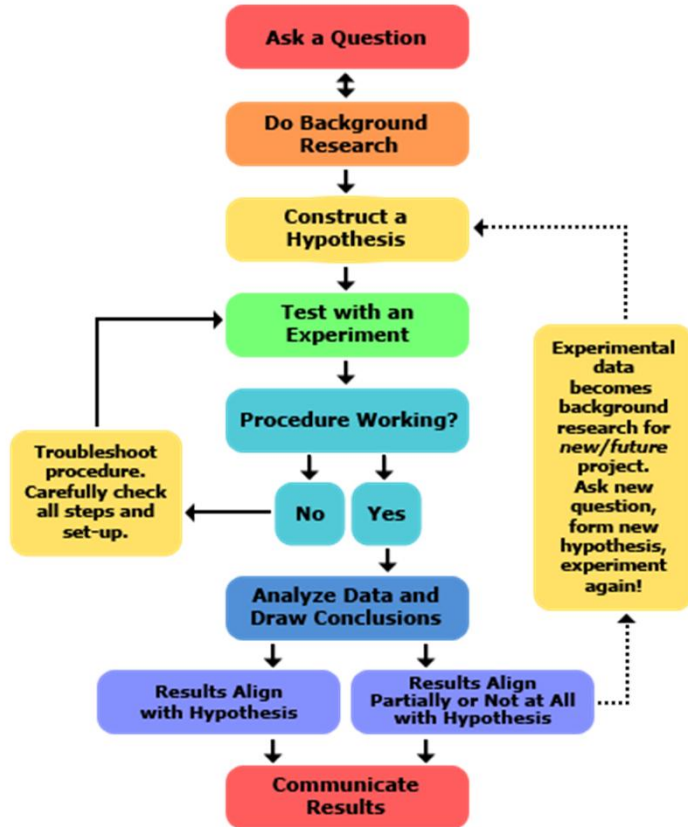
- Општи приступ истраживању – знање о принципима научне спознаје – објективност, поузданост, прецизност;
- Методолошки поступак истраживања (фазе истраживачког поступка) – знање о процедурама и поступцима научне спознаје (тј. о фазама научног истраживања);
- Методе и технике истраживања, тј. знање о методама и техникама истраживања и прикупљања података.



Научни метод



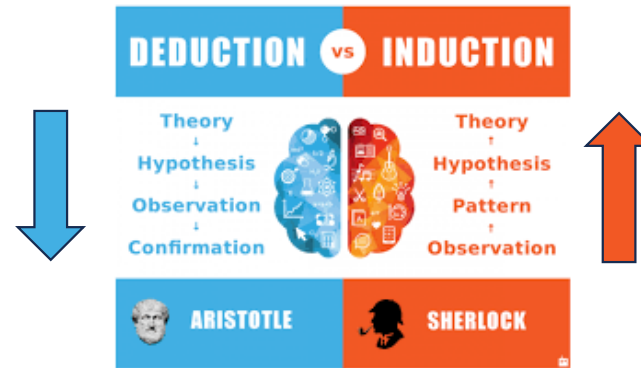
Научни метод



Научни метод vs. методе научног истраживања

Методе научног истраживања су само компонента научног метода. Примењују се у процесу научног истраживања и обухватају:

- Анализу/синтезу;
- Индукцију/дедукцију;
- Посматрање;
- Експеримент;
- Бројање;
- Мерење;
- Аналогије;
- Хипотезе.



*У зависности од литературе, методе научног истраживања се називају научне методе (обратити пажњу на разлику у роду – **научни метод**, као поступак спровођења истраживања и **научне методе**, као „алат“ за поједине кораке истраживања).



Научни метод vs. методе научног истраживања

Методе научног истраживања морају да задовољавају следеће аспекте:

- **Логичке** – логичка правила, која морају да се користе при дефинисању појмова, формулисању дефиниција и класификација, при доношењу судова, закључака и доказа. Ту се убрајају сви проблеми везани за испитивање улога хипотеза и научних теорија у научном истраживању, као и проблеми у вези са испитивањем логичке структуре научних закона и њихово повезивање у логички систем.
- **Техничке** – то су средства помоћу којих наука у зависности од својих циљева и развијености долази до нових сазнања.



Научни метод vs. методе научног истраживања

Методе научног истраживања морају да задовољавају следеће аспекте:

- Организацијске – оптималне организационе форме научног рада, комуникације међу научницима, обучавање млађег научног кадра, индивидуална и колективна продуктивност научника.
- Стратегијске – постављање и остваривање дугорочних теоријских циљева и задовољавање практичних проблема након решења неког теоријски значајног проблема у науци.



Методе научног излагања

- Део научног метода
- Веома важне за **дисеминацију** – служе за излагање и образложење већ стеченог знања и користе се кроз дефиниције, поделе, класификације, доказе итд.
- Ту спадају и педгаошке методе при образовању кадра за прилагођавање излагања научних сазнања.



Методе, технике, процедуре, протоколи

У зависности од литературе могу се наћи различите дефиниције и односи између ових појмова:

- **Метод истраживања** - начин стицања научног знања; може да има више модалитета, а у њиховом саставу може да постоји више **техника истраживања**.
- **Техника истраживања** - сложен и непосредно примењен оперативни облик метода; технику чине њени саставни делови - **инструменти и поступци**.

*Б. Белић, М. Цинцовић, „Методе научног рада“, Нови Сад, 2020.

М. Вуковић, Н. Штрбац, „Методологија научних истраживања“, Бор, 2019.



Методе, технике, процедуре, протоколи

У зависности од литературе могу се наћи различите дефиниције и односи између ових појмова:

- **Инструмент** - средство које се користи током примене метода у истраживању.
- **Поступак** - извршавање одређених радњи које су у складу са правилима одабраног метода и технике истраживања сагласне упутству у оквиру конкретног пројекта истраживања.

*Б. Белић, М. Цинцовић, „Методе научног рада“, Нови Сад, 2020.

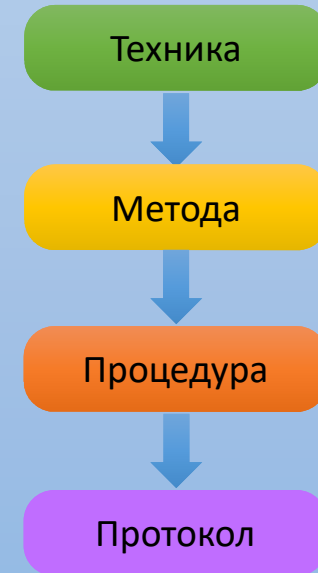
М. Вуковић, Н. Штрбац, „Методологија научних истраживања“, Бор, 2019.



Методе, технике, процедуре, протоколи



Међутим, постоје и
другачија тумачења
односа методе и
технике!!!



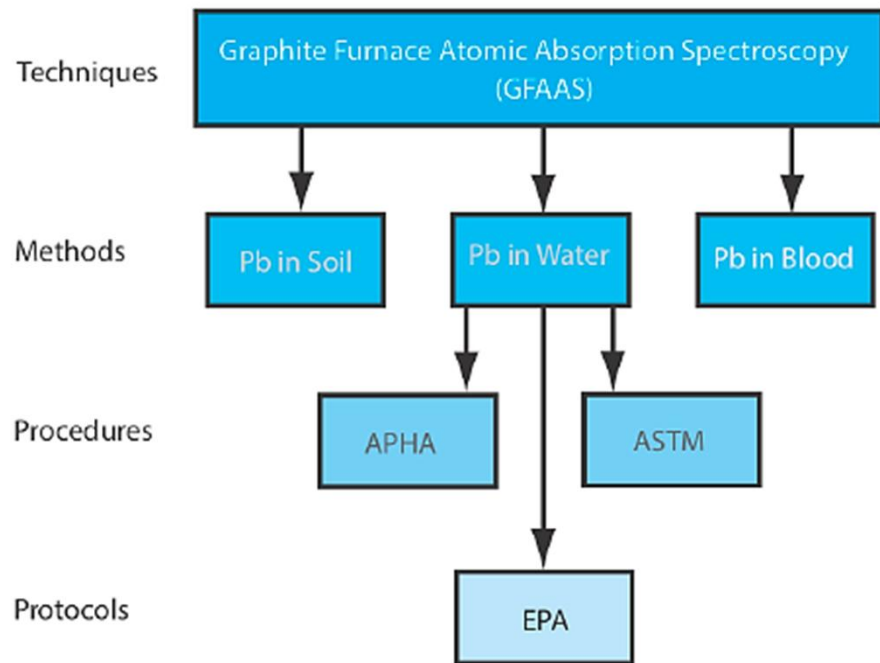
Методе, технике, процедуре, протоколи - другачији приступ

У физичкој хемији и сродним наукама:

- **Технике** су било који физички или хемијски принцип, који можемо да користимо да проучавамо аналит.
- **Метод** представља примену технике за специфични аналит или циљ испитивања.
- **Процедура** је скуп писаних инструкција како се поступак примењује на специфичан узорак, које могу да обухватају све од узимања/припреме узорака, преко тога како се превазилази проблем разних сметњи (присуство интерферентних супстанција, сигнала, итд.) до валидације резултата.
- **Протокол** је скуп веома стриктних принципа/упутстава који прецизирају какве процедуре треба да се користе, како би се резултати сматрали валидним у јавности и били прихваћени од стране одговарајућих организација/агенција који их прописују.



Методе, технике, процедуре, протоколи - другачији приступ



Пример: Приказ хијерархијске везе између технике, методе, процедуре и протокола.

Скраћенице: APHA - American Public Health Association

ASTM - American Society for Testing Materials

EPA - Environmental Protection Agency



Методологија - подсећање

Методологија - Представља све методске поступке (скуп методских поступака) које примењује наука или група сродних наука, да би се дошло до нових сазнања.

Методологија је наука о методама, део логике, који се бави теоријом научних сазнања, тј. проучава методе научног сазнања и има циљ да описује научну праксу и уводи логичка, техничка, организациона и стратегијска правила која треба да се примењују у науци да би се добили валидни научни резултати.

Она је нормативна наука и критика науке и научног метода.



Методологија - елементи

- **Логички** - научна сазнања о правилима логике и односима правила логике са методама и предметом истраживања.
- **Сазнајни (епистемолошки)** - разматра се систем потврђених научно-теоријских сазнања израслих на различитим перспективама, парадигмама, односно теоријско-методолошким приступима.
- **Технички** - непосредни поступци, инструменти, вештине који се користе у процесу стицања научног сазнања о истраживаном феномену.
- **Научно-стратегијски** - изражава се стремљење ка обезбеђењу систематизованог појмовног сазнања о феномену који је предмет истраживања.



Методологија - гране

- **Општа методологија** - предмет опште методологије су општа логичка правила и универзални принципи научног сазнања; заједничко свим научним областима.
- **Појединачне методологије** - узимају у обзир специфичности различитих научних области - медицинских, природних, техничких, друштвених ... наука.
- **Посебне (специјалне) методологије** - прилагођене су потребама истраживања у посебним научним дисциплинама - нпр. у биологији, хемији, технологији, политичким наукама...



Квалитети методологије научног истраживања

Карактеристике:

- **Искусвена (емпиријска)** - испитују се чињенице и верује се само хипотезама које су подржане релевантним чињеницама;
- **Репродукција сличних резултата** - други истраживачи могу да добију резултате генерисане истим методама - добро за проверу поузданости резултата;
- **Привременост** - добијени резултати су подложни дебати и сваки истраживач може да их доводи у питање. Закључци могу да се мењају, ако истраживачи дођу до нових чињеница.
- **Објективност** - не сме бити предрасуда и предубеђења



Квалитети методологије научног истраживања

Карактеристике:

- **Постојање структуре** - иако насумични/неорганизовани догађаји/појаве могу да буду основ истраживања, мора да се примењује структурирана и добро организована процедура.
- **Колективна** - пре почетка новог истраживања, научници ревидирају постојеће информације да би се уверили да нема понављања. Затим се информације проширују новим проналасцима и подацима, који се документују сликама, чињеницама и бројевима који помажу читаоцу разумевање извештаја и доношење правилних закључака.



Квалитети методологије научног истраживања

Карактеристике:

- **Детерминистичка** - истраживања покушавају да успоставе односе између различитих појава и фактора који утичу на њих.
- **Статистичка генерализација** - генерализација резултата добијених помоћу научних метода на друга истраживања сличне природе.
- **Рационализам** - истраживања почивају на логичком размишљању.



Физичка хемија

Ломоносов: „Физичка хемија је наука која користи законе и експерименте физике да би објаснила шта се дешава у смеши супстанција за време хемијске реакције.“

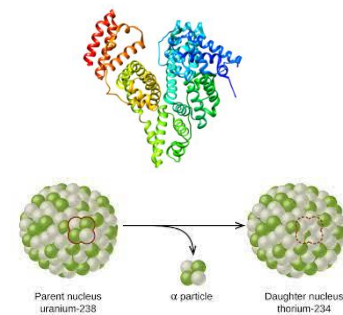
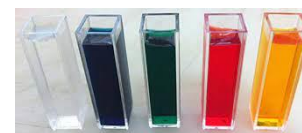
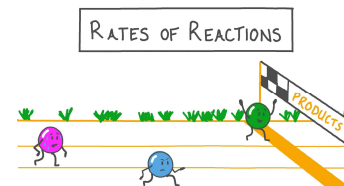
Физичка хемија користи принципе и методе и хемије и физике, као и математички апарат, да проучава како хемијска структура утиче на физичка својства материје.

Комбинацијом физике и хемије се добијају информације о физичко-хемијским својствима (фотохемијска, термохемијска...), специфичним својствима материјала, однос структуре и функције (у живим системима или биомолекулима), хемијска својства у системима у којима нема хемијских реакција.



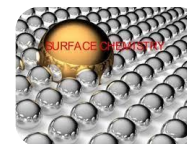
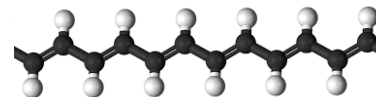
Дисциплине физичке хемије

- Хемијска кинетика - брзине и динамика хемијских реакција
- Термохемија/хемијска термодинамика - топлотни ефекти хемијских и фазних промена
- Спектрохемија - веза између спектра и структуре атома и молекула
- Биофизичка хемија - физичка хемија биолошких система и процеса
- Радиохемија и нуклеарна хемија - хемија радиоактивних изотопа и њихова примена у испитивању хемијских реакција



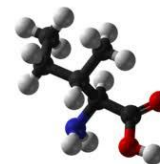
Дисциплине физичке хемије

- Физичка хемија животне средине - физичкохемијске анализе воде, ваздуха, земљишта, загађивача
- Електрохемија - интеракција супстанције са електричном струјом
- Фотохемија - утицај светлости на хемизам, испитивање фотохемијских реакција
- Физичка хемија чврстог стања - структура и физичкохемијска својства кристала
- Физичка хемија макромолекула - структура и својства макромолекула (полимера)
- Хемија површина - реакције на површини материјала

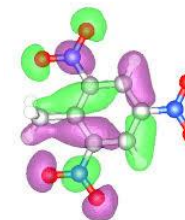
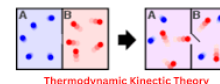


Дисциплине физичке хемије

- Физичка органска хемија - веза структуре и хемизма органских једињења
- Физичка хемија флуида - испитивање и моделовање кретања честица у гасовитом и течном стању
- Статистичка термодинамика - одређивање термодин. величина прорачуном динамичких стања система на нивоу микроскопских конституената
- Квантна хемија - проучавање структуре и спектра молекула помоћу алата квантне механике.

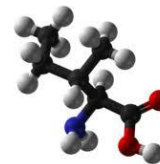


Statistical Mechanics

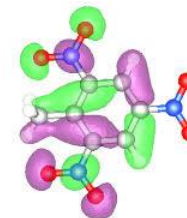
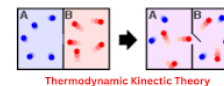


Дисциплине физичке хемије

- Физичка органска хемија - веза структуре и хемизма органских једињења
- Физичка хемија флуида - испитивање и моделовање кретања честица у гасовитом и течном стању
- Статистичка термодинамика - одређивање термодин. величина прорачуном динамичких стања система на нивоу микроскопских конституената
- Квантна хемија - проучавање структуре и спектра молекула помоћу алата квантне механике.



Statistical Mechanics



Физичкохемијске методе

Експерименталне:

Спектроскопије: инфрацрвена, Уљ-вид., раманска, фотоелектронска спектроскопија Х-зрака, флуоресентна, Ожеова електронска, атомска апсорпциона, магнетно-резонантна - ЕПР, НМР, ДНП (динамичка нуклеарна поларизација), циркуларни дихроизам...

Електрохемијске: потенциостатске, галваностатске, цикловолтаметрија, поларографија...

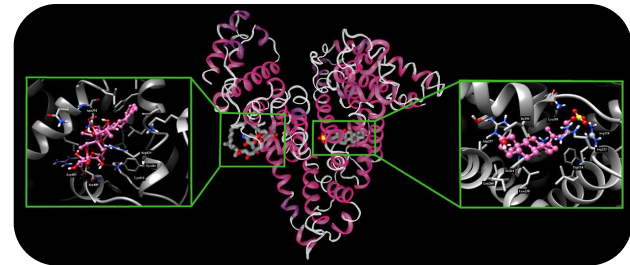
Калориметријске: ДСЦ, ДТА, ТГА, ИТЦ...

Хроматографске: препаративне (гел филтарција, ТЛЦ...) и аналитичке (ХПЛЦ, ФПЛЦ, ГЦ са различитим детекторима)

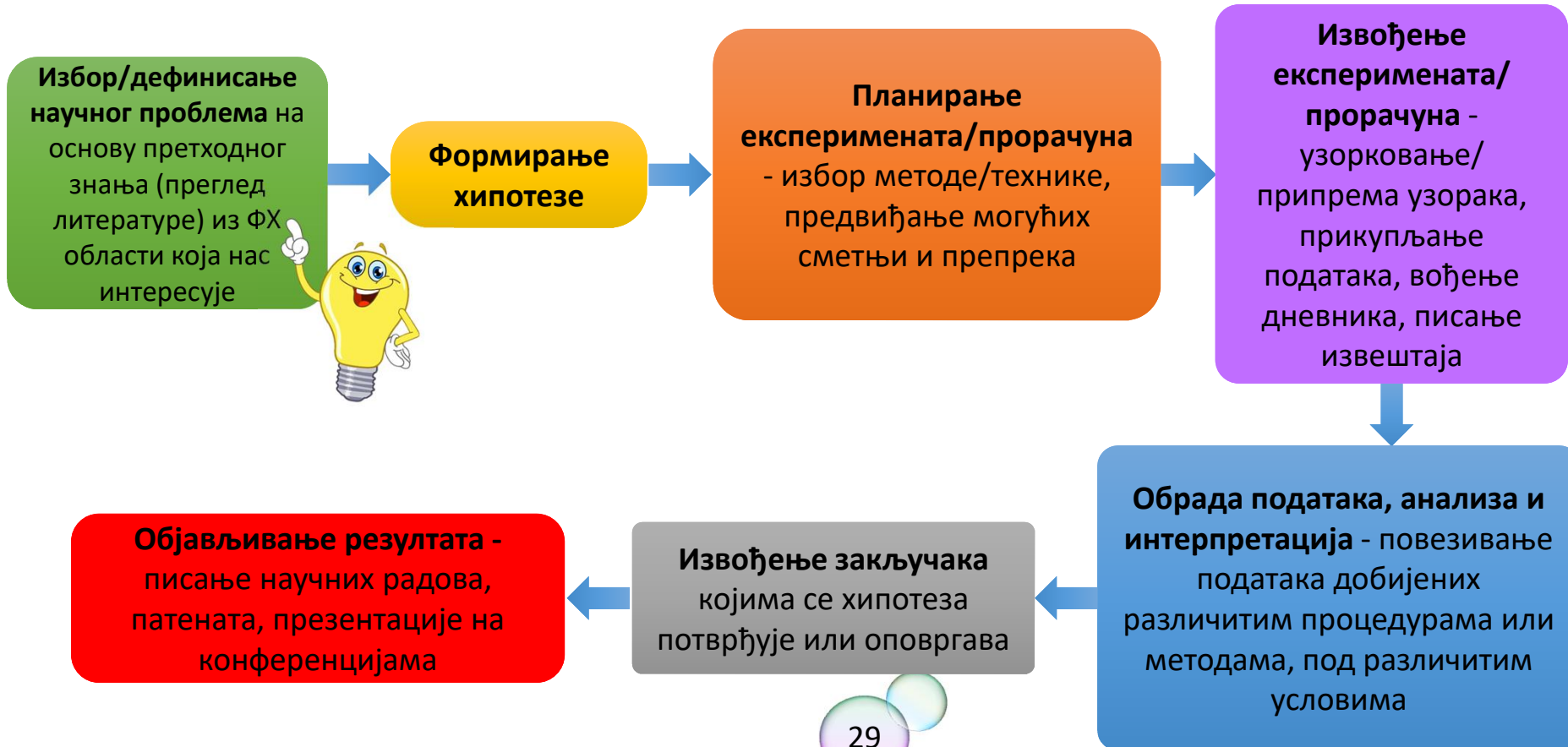
Карактеризација различитих материјала и наночестица: дифракција Х-зрачења, микроскопије (СЕМ, ТЕМ, АФМ), масена спектрометрија, динамичко расејање светлости, електрофоретско расејање светлости, кварцна микровага

Теоријске:

Ab initio прорачуни, семи-емпиријске, ДФТ, молекулски докинг, молекулска динамика, Монте-Карло симулације



Процес физикохемијског истраживања



Литература

- Б. Белић, М. Цинцовић, „Методе научног рада“, Нови Сад, 2020.
- М. Вуковић, Н. Штрбац, „Методологија научних истраживања“, Бор, 2019.

