

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования "Пермский  
государственный национальный исследовательский  
университет"**

**Кафедра органической химии**

Авторы-составители: **Шуров Сергей Николаевич  
Храмцова Екатерина Евгеньевна  
Кобелев Александр Иванович**

Рабочая программа дисциплины  
**МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**  
Код УМК 85077

Утверждено  
Протокол №1  
от «31» августа 2022 г.

Пермь, 2022

## **1. Наименование дисциплины**

Молекулярная спектроскопия

## **2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина входит в обязательную часть Блока « Б.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление подготовки: **04.03.01** Химия  
направленность Химия

### **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

В результате освоения дисциплины **Молекулярная спектроскопия** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

**04.03.01** Химия (направленность : Химия)

**ПК.1** Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения научно-исследовательских задач в профессиональной области, поставленных специалистом более высокой квалификации

#### **Индикаторы**

**ПК.1.2** Выбирает и использует технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования

#### 4. Объем и содержание дисциплины

<b>Направление подготовки</b>	04.03.01 Химия (направленность: Химия)
<b>форма обучения</b>	очная
<b>№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины</b>	10
<b>Объем дисциплины (з.е.)</b>	3
<b>Объем дисциплины (ак.час.)</b>	108
<b>Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:</b>	42
<b>Проведение лекционных занятий</b>	14
<b>Проведение практических занятий, семинаров</b>	28
<b>Самостоятельная работа (ак.час.)</b>	66
<b>Формы текущего контроля</b>	Входное тестирование (1) Письменное контрольное мероприятие (4)
<b>Формы промежуточной аттестации</b>	Зачет (10 триместр)

## 5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

### Молекулярная спектроскопия

В курсе рассматривается совокупность четырёх наиболее эффективных методов исследования органических веществ, краткие физические основы методов и основные направления их применения.

### Электромагнитный спектр

. Тема 1. Уравнение Планка, частота, длина волны, энергия электромагнитного излучения. Спектры испускания и спектры поглощения.

Излагаются ранние методы установления строения химических соединений и перечисляются основные современные физико-химические методы исследования (всего их более 50). Приводится уравнение Планка, названия входящих в него параметров. Описываются спектры испускания и спектры поглощения.

Тема 2. Соотношения между энергетическими и волновыми параметрами излучения.

Приводятся математические выражения для расчета параметров излучения, выраженных в различных единицах измерения.

Тема 3. Изменения в ядрах, атомах, молекулах и кристаллах под воздействием излучения разной частоты.

Приводится общая шкала электромагнитных колебаний с соответствующими названиями, указываются изменения в атомах и молекулах, вызываемых данного вида излучением. Приводится рекомендуемая литература для изучения дисциплины.

### УФ-спектроскопия

Тема 4. Основной закон светопоглощения, области длин волн и параметры УФ-спектров.

Описываются 4 основные области УФ-спектроскопии, приводятся законы светопоглощения Бугера-Ламберта и Бэра, а также объединенный закон. Дается определение УФ-спектра, его общий вид и правила описания.

Тема 5. Типы сдвигов и эффектов в УФ-спектроскопии, классификация электронных переходов. Объясняются и графически изображаются бато- и гипсохромный сдвиги, гипер- и гипохромный эффекты. Дается диаграмма энергетического состояния орбиталей в органических соединениях и классификация электронных переходов Кэша и Малликена. Проводится общее ознакомление с правилами отбора электронных переходов.

Тема 6. Хромофорные группы, поглощение УФ-излучения разными классами химических соединений. Дается определение хромофорных и ауксохромных групп и зависимость положения максимумов поглощения от энергии соответствующих переходов. Указывается классификация (К, Е, R, В – полосы) и описываются электронные спектры отдельных классов химических соединений.

Тема 7. Основные возможности и направления применения УФ-спектроскопии.

Перечисляются возможности и ограничения метода.

### ИК-спектроскопия

Тема 8. Теоретические основы ИК-спектроскопии.

Приводится пример колебания двухатомной молекулы на модели пружинного маятника, показываются массовая и силовая составляющая частоты. Дается определение характеристических частот и показывается графический и общий вид ИК-спектра. Приводится классификация интенсивности полос поглощения (сильных, средних, слабых) и их ширины.

Тема 9. Валентные и деформационные колебания. Факторы, влияющие на их частоту.

Приводится определение валентных и деформационных колебаний (плоскостных и внеплоскостных) и их обозначение, а также их симметричность и антисимметричность. Дается зависимость частоты колебания от природы растворителя, агрегатного состояния вещества, диполь-дипольных взаимодействий и образования водородной связи, электронных влияний. Описываются способы снятия спектров.

Тема 10. ИК-спектры отдельных классов химических соединений, области характеристических частот. Приводится общий обзор зависимости положения характеристических частот от массы атомов и числа кратных связей, от природы различных функциональных групп и классов органических соединений. Более подробное знакомство с этими вопросами выносится на самостоятельное изучение [7.1. С. 34-48].

Тема 11. Возможности и ограничения метода ИК-спектроскопии. КР-спектроскопия.

Дается описание возможностей метода и его ограничений, а также предмета исследований и возможностей КР-спектроскопии. Проводится ознакомление с применением ИК-спектроскопии на основе различных примеров.

### **ЯМР-спектроскопия**

Тема 12. Теоретические основы ЯМР-спектроскопии.

Приводится зависимость магнитных свойств ядер от массового и зарядового числа изотопа. Описываются основные изотопы элементов со спиновым числом ядра  $\frac{1}{2}$  и их положение во внешнем магнитном поле. Выводится основное соотношение ЯМР, упоминаются релаксационные процессы.

Тема 13. Основные параметры спектров ЯМР  $^1\text{H}$  (ПМР).

Описывается магнитное экранирование и химический сдвиг протонов, эталонные соединения и шкалы  $\tau$  и  $\delta$ . Приводятся общие интервалы химических сдвигов разного типа протонов. Дается понятие прямого и непрямого спин-спинового взаимодействия и расщепления сигналов в спектре ПМР. Приводится формула общего числа линий и понятие константы спин-спинового взаимодействия (КССВ).

Описывается мультиплетность сигналов наиболее часто встречающихся алкильных групп. Дается понятие вицинальных и геминальных КССВ.

Тема 14. ЯМР-спектроскопия на ядрах  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$  и её особенности.

Дается общая характеристика этих видов спектроскопии, а более подробное изучение вопроса выносится на самостоятельное изучение [7.1. С. 78-88].

Тема 15. Задачи решаемые с помощью ЯМР-спектроскопии.

Дается понятие интегральной интенсивности сигналов, приводятся примеры задач, решаемых с помощью метода.

### **Масс-спектрометрия**

Тема 16. Физические основы масс-спектрометрии. Приводятся способы ионизации органических молекул и основные принципы фрагментации молекулярного иона. Кратко описываются приборная база и условия получения масс-спектров.

Тема 17. Фрагментация отдельных классов органических соединений. Рассматриваются основные направления фрагментации отдельных классов органических соединений. Описываются возможности образования перегруппировочных ионов, в том числе перегруппировки Мак-Лафферти. Приводятся примеры применения масс-спектрометрии.

## **6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

## **7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине**

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

## 8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

### Основная:

1. Устынюк, Ю. А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Часть 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынюк. — Москва : Техносфера, 2016. — 292 с. — ISBN 978-5-94836-410-0. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт].  
<http://www.iprbookshop.ru/58860.html>

2. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков: учебник для химических специальностей вузов / Ю. М. Воловенко [и др.]. — Москва: ICSPF PRESS, 2011, ISBN 978-5-903078-34-9.-69410.-Библиогр.: с. 680

### Дополнительная:

1. Гржегоржевский, К. В. Основы молекулярной спектроскопии. Спектры оптического поглощения и люминесценции, применение в изучении полиоксометаллатных нанокластеров : учебное пособие / К. В. Гржегоржевский, А. А. Остроушко. — Екатеринбург : Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2015. — 212 с. — ISBN 978-5-7996-1652-6. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/66564.html>

2. Хребтова, С. Б. Физические методы исследования вещества. Задания для самостоятельной работы студентов. Часть 1. Спектроскопия ЯМР и ЭПР : учебное пособие / С. Б. Хребтова, А. Т. Телешев, Н. Г. Ярышев. — Москва : Московский педагогический государственный университет, 2015. — 20 с. — ISBN 978-5-4263-0329-4. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт].  
<http://www.iprbookshop.ru/70160.html>



## **9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины**

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

Образовательный процесс по дисциплине **Молекулярная спектроскопия** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

1. презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);
2. доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
3. доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

Перечень необходимого лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения :

1. Офисный пакет приложений «Apache OpenOffice».
2. Приложение позволяющее просматривать и воспроизводить медиаконтент PDF-файлов «Adobe Acrobat Reader DC».
3. Программы, демонстрации видео материалов (проигрыватель) «WindowsMediaPlayer».
4. Программа просмотра интернет контента (браузер) «Google Chrome».
5. Офисный пакет приложений «LibreOffice».

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

- система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).
- система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.
- система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

## **11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

### **1. Лекционные занятия**

Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

### **2. Занятий семинарского типа (семинары, практические занятия)**

Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

### **3. Самостоятельная работа**

Аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.

Помещения Научной библиотеки ПГНИУ

### **4. Проведение консультаций (индивидуальных) и текущего контроля**

Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с

соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине  
Молекулярная спектроскопия**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.  
Индикаторы и критерии их оценивания**

**ПК.1**

**Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения научно-исследовательских задач в профессиональной области, поставленных специалистом более высокой квалификации**

<b>Компетенция (индикатор)</b>	<b>Планируемые результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания результатов обучения</b>
<b>ПК.1.2</b> Выбирает и использует технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования	Знает как выбирать и использовать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования	<p style="text-align: center;"><b>Неудовлетворител</b></p> Имеет смутные представления о том, как выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения задач. Имеет смутное представление о пробоподготовке. <p style="text-align: center;"><b>Удовлетворительн</b></p> Представляет общие принципы выбора и использования технических средств и методов испытаний для решения задач. Знает общие принципы пробоподготовки. <p style="text-align: center;"><b>Хорошо</b></p> Четко представляет принципы выбора и использования технических средств и методов испытаний для решения задач. Имеет знания об общих принципах пробоподготовки. <p style="text-align: center;"><b>Отлично</b></p> В тонкостях представляет принципы выбора и использования технических средств и методов испытаний для решения задач. Имеет знания принципов пробоподготовки. Самостоятельно предлагает более оптимальный метод приготовления пробы для каждого конкретного задания.

## Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : СУОС

**Вид мероприятия промежуточной аттестации :** Зачет

**Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации :** Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

**Максимальное количество баллов :** 100

### Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 44 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 44 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
<b>Входной контроль</b>	Электромагнитный спектр <b>Входное тестирование</b>	Знание физических основ природы электромагнитного излучения: длины волны, частоты, энергии, скорости распространения.
<b>ПК.1.2</b> Выбирает и использует технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования	УФ-спектроскопия <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	1. Знание физических принципов возникновения УФ-спектра.2. Умение распознавать внешний вид УФ-спектров.3. Знание обозначения осей в УФ-спектроскопии.4. Владение навыками расчёта сопряжённых систем по Вудворду.
<b>ПК.1.2</b> Выбирает и использует технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования	ИК-спектроскопия <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	1. Знание физических принципов возникновения ИК-спектра.2. Умение распознавания внешнего вида ИК-спектров.3. Знание альтернативных обозначений осей ИК-спектров.4. Владение навыками нахождения функциональных групп по ИК-спектрам.

<b>Компетенция (индикатор)</b>	<b>Мероприятие текущего контроля</b>	<b>Контролируемые элементы результатов обучения</b>
<b>ПК.1.2</b> Выбирает и использует технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования	<b>ЯМР-спектроскопия</b> <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	1. Знание условий возникновения спектра ЯМР и его физической природы. 2. Умение распознавать внешний вид спектров ЯМР. 3. Знание обоих видов шкал в ЯМР-спектроскопии. 4. Умение использовать основные показатели ЯМР-спектров для решения структурных и физико-химических задач.
<b>ПК.1.2</b> Выбирает и использует технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения задач НИР, поставленных специалистом более высокой квалификации, готовит объекты исследования	<b>Масс-спектрометрия</b> <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	1. Знание условий возникновения масс-спектров под действием электронного удара. 2. Выработка навыков отнесения масс-спектров различного вида к определённым группам классов химических соединений. 3. Умение использовать данные масс-спектрометрии для нахождения молекулярной массы химических соединений и решения типовых структурных задач.

### **Спецификация мероприятий текущего контроля**

#### **Электромагнитный спектр**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **0**

Проходной балл: **0**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
1. Правильность ответа на один из 10 тестовых вопроса	1

#### **УФ-спектроскопия**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
2. Правильность ответа на каждое из 3 расчётных заданий	15
1. Правильность ответа на каждое из 5 тестовых задания. При неполном ответе может быть вычтен 1 балл.	10

## **ИК-спектроскопия**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
1. Правильность ответа на каждое из 10 тестовых задания. При неполном ответе могут быть снижены 1-2 балла.	25

## **ЯМР-спектроскопия**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
1. Правильность ответа на каждое из 15 тестовых заданий. При неполном ответе может быть вычтено 0.5 - 1.0 балла.	25

## **Масс-спектрометрия**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **25**

Проходной балл: **11**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
2. Правильность решения каждой из 3 структурных задач. При неполном или неточном решении могут быть вычтены 1-4 балла.	15
1. Правильность ответа на каждое из 5 тестовых задания. При неполном ответе могут быть вычтены 1-2 балла.	10