

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

Кафедра органической химии

Авторы-составители: **Павлов Петр Тимофеевич**

Рабочая программа дисциплины

**ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ И СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО
РАССЕЯНИЯ**

Код УМК 85288

Утверждено
Протокол №1
от «29» мая 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

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

Направление: **28.04.01** Нанотехнологии и микросистемная техника
направленность Материалы микро- и наносистемной техники

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность : Материалы микро- и наносистемной техники)

ПК.1 готовность формулировать цели и задачи научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники, обоснованно выбирать теоретические и экспериментальные методы и средства решения сформулированных задач

Индикаторы

ПК.1.1 Определяет цели и задачи современных научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность: Материалы микро- и наносистемной техники)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	2
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	36
Проведение лекционных занятий	12
Проведение практических занятий, семинаров	24
Самостоятельная работа (ак.час.)	72
Формы текущего контроля	Письменное контрольное мероприятие (3)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (2 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

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. 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. Общие изменения в ядрах, атомах, молекулах и кристаллах под воздействием излучений разной частоты (длины волны).

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

Тема 4. Теоретические основы ИК-спектроскопии. Частота колебания двухатомной молекулы: силовая и массовая составляющие частоты. Характеристическая частота.

Приводится пример колебания двухатомной молекулы на модели пружинного маятника, показываются массовая и силовая составляющие 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 5. 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 6. 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 и неорганических соединений.

Тема 7. Возможности и ограничения метода ИК-спектроскопии, задачи, решаемые с его помощью.

Дается описание возможностей метода и его ограничений.

Тема 8. Схема возникновения спектров КР. Типы колебаний, активные в КР-спектрах. Взаимодополняемость ИК- и КР-спектроскопии.

Схема возникновения спектров КР. Дается диаграмма рэлеевского и комбинационного рассеяния света. Указывается тип колебаний, активных в данного вида спектрах. Подчеркивается взаимодополняемость ИК- и КР-спектроскопии.

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. Николаев, А. А. Физико-химические методы исследования флотационных систем. Жидкая фаза. Граница раздела фаз твердое–жидкость : учебное пособие / А. А. Николаев. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2017. — 65 с. — ISBN 978-5-906846-72-3. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/78542>
2. Дормидонтов Ю. П. Методы УФ, ИК и ЯМР спектроскопии и их применение в органической химии: учебное пособие по спецкурсу/Ю. П. Дормидонтов.-Пермь,2008, ISBN 978-5-7944-1156-0.-154.

Дополнительная:

1. Казицына Л. А.,Куплетская Н. Б. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектроскопии в органической химии: учебное пособие для химических специальностей университетов/Л. А. Казицына, Н. Б. Куплетская.-Москва:Издательство Московского университета,1979.-238.

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 **ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий)
- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета
- тестирование с использованием сайта testua.ru
- поисковые системы Google и Яндекс, электронная почта

Перечень необходимого лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения:

1. Приложение позволяющее просматривать и воспроизводить медиаконтент PDF-файлов «Adobe Acrobat Reader DC»
2. Программы демонстрации видео материалов (проигрыватель) "WindowsMediaPlayer"
3. Программа просмотра интернет контента (браузер) "Google Chrome"

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

Вид работ

1. Лекционные занятия - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской..
2. Практические занятия - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской
3. Групповые (индивидуальные) консультации - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской.
4. Текущий контроль - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской.
5. 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.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютерами 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
ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния**

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

ПК.1

готовность формулировать цели и задачи научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники, обоснованно выбирать теоретические и экспериментальные методы и средства решения сформулированных задач

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.1.1 Определяет цели и задачи современных научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники</p>	<p>Определяет цели и задачи современных научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Отсутствие даже самых общих представлений о принципах поиска областей полос поглощения отдельных классов химических соединений. Практически не владеет теоретическими основами ИК-спектроскопии и терминологией дисциплины. Не может отличить внешний вид спектров. Решает тестовое задание менее, чем на 13 баллов.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Общие, но не структурированные знания основ принципов поиска областей полос поглощения отдельных классов химических соединений. Частично сформировано знание основные понятий и терминологии дисциплины, различает внешний вид ИК-спектров. Решает тестовое задание не менее, чем на 13 баллов.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основ принципов поиска областей полос поглощения отдельных классов химических соединений. Достаточно уверенно владеет терминологией дисциплины и знанием её теоретических основ. Уверенно различает внешний вид спектров. Решает тестовое задание не менее, чем на 19 баллов.</p> <p align="center">Отлично</p> <p>Практически полностью сформированы знания принципов поиска областей полос поглощения отдельных классов химических</p>

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		Отлично соединений. свободно владеет основными понятиями и терминологией дисциплины, не задумываясь различает внешний вид ИК-спектров. Решает тестовое задание не менее, чем на 25 баллов.

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

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 43 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 43 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.1 Определяет цели и задачи современных научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники	Тема 6. ИК-спектры отдельных классов химических соединений, области характеристических частот. Письменное контрольное мероприятие	Знание теоретических основ ИК-спектроскопии: интервала волновых чисел, типов полос поглощения, интенсивности полос, количества колебательных степеней свободы в молекулах, влияния растворителей, соседних диполей, конформации, внутри- и межмолекулярных водородных связей на положение полос поглощения; знание общих принципов нахождения полос поглощения в спектрах различного типа соединений.
ПК.1.1 Определяет цели и задачи современных научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники	Тема 7. Возможности и ограничения метода ИК-спектроскопии, задачи, решаемые с его помощью. Письменное контрольное мероприятие	Знание основных возможностей метода ИК-спектроскопии: идентификация функциональных групп, установление и подтверждение структурных формул, различение изомерных соединений, изучение внутри- и межмолекулярной водородной связи, контроль за ходом химических превращений.

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.1 Определяет цели и задачи современных научных исследований в области нанотехнологии и микросистемной техники	Тема 8. Схема возникновения спектров КР. Типы колебаний, активные в КР-спектрах. Взаимодополняемость ИК- и КР-спектроскопии. Письменное контрольное мероприятие	Знание теоретических основ КР-спектроскопии: рэлеевское и комбинационное рассеяние электромагнитного излучения, влияние поляризуемости молекул на интенсивность рассеяния, вид колебаний, активных в КР-спектре, взаимодополняемость ИК- и КР-спектроскопии; умение решать более сложные структурные задачи.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Тема 6. ИК-спектры отдельных классов химических соединений, области характеристических частот.

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

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

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность решения каждого тестового вопроса из 10. При неполном решении возможно снятие 1-2 баллов.	30

Тема 7. Возможности и ограничения метода ИК-спектроскопии, задачи, решаемые с его помощью.

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

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

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность решения каждой из 5 структурных заданий. За неправильное отнесение 1 полосы поглощения или неверный шаг в идентификации последовательных формул в цепочке соединений снимается 1 балл	30

Тема 8. Схема возникновения спектров КР. Типы колебаний, активные в КР-спектрах. Взаимодополняемость ИК- и КР-спектроскопии.

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

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

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **17**

Показатели оценивания	Баллы
Правильность решения каждой структурной задачи из 5 оценивается в 4 балла. За каждую	25

правильную структурную формулу из 5 прибавляется 1 балл. За неправильное отнесение полосы снимается 1 балл.	
Правильность решения каждого тестового задания из 5 оценивается в 3 балла. За неполное решение может быть снято 1-2 балла.	15