

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 вариативную часть Блока « С.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Специальность: **04.05.01** Фундаментальная и прикладная химия
направленность Программа широкого профиля

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

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

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность : Программа широкого профиля)

ПК.2 Способен на основе критического анализа результатов работы оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии

Индикаторы

ПК.2.1 Систематизирует информацию, полученную в результате научно-исследовательской работы, критически анализирует её

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность: Программа широкого профиля)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	14
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	42
Проведение лекционных занятий	14
Проведение практических занятий, семинаров	28
Самостоятельная работа (ак.час.)	66
Формы текущего контроля	Входное тестирование (1) Письменное контрольное мероприятие (4)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (14 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 ^1H (ПМР).

Описывается магнитное экранирование и химический сдвиг протонов, эталонные соединения и шкалы τ и δ . 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}C , ^{19}F , ^{31}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.2

Способен на основе критического анализа результатов работы оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.2.1 Систематизирует информацию, полученную в результате научно-исследовательской работы, критически анализирует её</p>	<p>Знать: области применения, возможности и ограничения каждого вида спектроскопии; физические принципы каждого метода; основные марки спектрометрических приборов, имеющихся на факультете; условия получения спектров. Уметь: распознавать внешний вид каждого типа спектров, описывать их вербально; изыскивать и сохранять нужный спектр в базе полиграфических и электронных данных. Владеть: общими методами пробоподготовки; навыками расшифровки каждого вида спектров; навыками подбора конкретных спектрометрических методов для решения возникающих научных и практических задач</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Не знает области применения, возможности и ограничения каждого вида спектроскопии; физические принципы каждого метода; основные марки спектрометрических приборов, имеющихся на факультете; условия получения спектров. Не умеет: распознавать внешний вид каждого типа спектров, описывать их вербально; изыскивать и сохранять нужный спектр в базе полиграфических и электронных данных. Не владеет общими методами пробоподготовки; навыками расшифровки каждого вида спектров; навыками подбора конкретных спектрометрических методов для решения возникающих научных и практических задач</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Знает области применения, возможности и ограничения каждого вида спектроскопии; физические принципы каждого метода; основные марки спектрометрических приборов, имеющихся на факультете; условия получения спектров. Не умеет распознавать внешний вид каждого типа спектров, описывать их вербально; изыскивать и сохранять нужный спектр в базе полиграфических и электронных данных. Не владеет общими методами пробоподготовки; навыками расшифровки каждого вида спектров; навыками подбора конкретных спектрометрических методов для решения возникающих научных и практических задач</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Знает области применения, возможности и</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>ограничения каждого вида спектроскопии; физические принципы каждого метода; основные марки спектрометрических приборов, имеющихся на факультете; условия получения спектров. Умеет распознавать внешний вид каждого типа спектров, описывать их вербально; изыскивать и сохранять нужный спектр в базе полиграфических и электронных данных. Не владеет общими методами пробоподготовки; навыками расшифровки каждого вида спектров; навыками подбора конкретных спектрометрических методов для решения возникающих научных и практических задач</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Знает области применения, возможности и ограничения каждого вида спектроскопии; физические принципы каждого метода; основные марки спектрометрических приборов, имеющихся на факультете; условия получения спектров. Умеет распознавать внешний вид каждого типа спектров, описывать их вербально; изыскивать и сохранять нужный спектр в базе полиграфических и электронных данных. Владеет общими методами пробоподготовки; навыками расшифровки каждого вида спектров; навыками подбора конкретных спектрометрических методов для решения возникающих научных и практических задач</p>

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
Входной контроль	Электромагнитный спектр Входное тестирование	Знание физических основ природы электромагнитного излучения: длины волны, частоты, энергии, скорости распространения.
ПК.2.1 Систематизирует информацию, полученную в результате научно-исследовательской работы, критически анализирует её	УФ-спектроскопия Письменное контрольное мероприятие	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.
ПК.2.1 Систематизирует информацию, полученную в результате научно-исследовательской работы, критически анализирует её	ИК-спектроскопия Письменное контрольное мероприятие	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.

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.2.1 Систематизирует информацию, полученную в результате научно-исследовательской работы, критически анализирует её	ЯМР-спектроскопия Письменное контрольное мероприятие	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.
ПК.2.1 Систематизирует информацию, полученную в результате научно-исследовательской работы, критически анализирует её	Масс-спектрометрия Письменное контрольное мероприятие	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**

Показатели оценивания	Баллы
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**

Показатели оценивания	Баллы
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**

Показатели оценивания	Баллы
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**

Показатели оценивания	Баллы
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**

Показатели оценивания	Баллы
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