

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

*Факультет физико-математических и естественных наук*

Рекомендовано МССН  
по направлению 04.00.00 «Химия»

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины**

**МОЛЕКУЛЯРНЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ**

**Рекомендуется для направления подготовки**

**04.04.01 «ХИМИЯ»**

**Направленность программы (профиль)**

**«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»**

## 1. Цели и задачи дисциплины.

Получение общих представлений о физических основах инфракрасной спектроскопии, навыков получения и анализа совокупности спектральных характеристик органических соединений.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП ВО.

Дисциплина «Молекулярный спектральный анализ» относится к вариативной части блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 и является дисциплиной модуля 1 по выбору. Для успешного освоения дисциплины учащийся магистратуры обязан иметь базовые знания на уровне бакалавра. Владение навыками получения и интерпретации спектральных характеристик органических соединений необходимо для решения самого широкого круга современных научных и технических задач.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

### Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД НИР Экспериментальные методы исследования в химии Основы биотехнологии	Актуальные задачи современной химии ЯМР органических соединений Домино реакции в синтезе гетероциклов Химия гетероциклических соединений Масс-спектрометрия органических соединений Сtereoхимия Основы дизайна ЛП Химия природных соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД НИР Экспериментальные методы исследования в химии Основы биотехнологии	Актуальные задачи современной химии ЯМР органических соединений Домино реакции в синтезе гетероциклов Химия гетероциклических соединений Масс-спектрометрия органических соединений Сtereoхимия Основы дизайна ЛП Химия природных соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД	Актуальные задачи современной химии ЯМР органических соединений Домино реакции в синтезе гетероциклов Химия гетероциклических соединений Масс-спектрометрия органических соединений

	НИР Экспериментальные методы исследования в химии Основы биотехнологии	Сtereoхимия Основы дизайна ЛП Химия природных соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
--	--	--

### 3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

#### Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

**Знать:** теоретические и практические основы ИК- и УФ-анализа, максимумы полос поглощения при ИК-анализе основных функциональных групп, включая валентные и деформационные колебания различных вариантов связей между углеродом, азотом, кислородом и водородом, углеродом и кислородом, углеродом и азотом; основные способы пробоподготовки образцов для регистрации ИК-спектра; максимум полос поглощения в условия УФ-спектроскопии

**Уметь:** различать по комплексу спектральных данных основные классы органических соединений; самостоятельно обнаруживать полосы поглощения основных функциональных групп органических соединений, формировать предположения о структуре анализируемого соединения, включая относительное положение заместителей в ароматических соединениях; подтверждать выдвинутые гипотезы данными других физико-химических методов исследований

**Владеть:** навыками обработки комплекса спектральных данных, навыками пробоподготовки образцов для регистрации ИК-спектра и проведения калибровки для

количественного определения аналитов; навыками обоснованного выбора наилучшего метода и способа изучения строения органического соединения с помощью.

#### 4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **3** зачетные единицы.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		3			
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	<b>54</b>	<b>54</b>			
В том числе:					
<i>Лекции</i>	36	36			
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>					
<i>Семинары (С)</i>					
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	18	18			
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	<b>54</b>	<b>54</b>			
Общая трудоемкость	час	<b>108</b>	<b>108</b>		
	зач. ед.	<b>3</b>	<b>3</b>		

#### 5. Содержание дисциплины

##### 5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Принципы молекулярного спектрального анализа	Электромагнитный спектр. Основные характеристики излучения. Взаимодействие излучения с веществом. Основные особенности атомных и молекулярных спектров. Классификация методов молекулярного спектрального анализа. Значение молекулярного спектрального анализа в химии.
2.	Принципы ИК-спектроскопии	Особенности строения многоатомных молекул. Закон Гука и уравнение Шредингера в применении к многоатомным молекулам. Основные задачи теории колебаний молекул. Колебания многоатомной молекулы, как взаимосвязанной системы. Число возможных колебаний. Нормальные колебания и их свойства. Классификация нормальных колебаний. Симметрия молекул. Элементы классической теории инфракрасных спектров поглощения. Основы классической теории комбинационного рассеяния. Правила отбора. Характеристичность частоты в колебательном спектре молекулы. Особенности квантово-химического рассмотрения колебаний многоатомных молекул.
3.	Принципы количественной ИК-спектроскопии	Закон поглощения света. Способы представления спектрофотометрических величин. Инструментальные и физико-химические причины отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бееера. Факторы, определяющие интегральную интенсивность полос поглощения в инфракрасных спектрах. Экстраполяционный метод Буржена и др. Метод прямого интегрирования. Метод поправок. О точности измерения интенсивностей инфракрасных полос поглощения. Абсолютные интенсивности в инфракрасных

		спектрах молекул.
4.	Практические аспекты измерения ИК-спектров	Общая характеристика спектрометров для анализа ИК спектров. Источники излучения. Монохроматоры. Приемники инфракрасного излучения. Усилительные и регистрирующие устройства. Современные модели инфракрасных спектрометров. Градуировка призмных спектрометров. Техника приготовления образцов для анализа.
5.	ИК-спектроскопия органических соединений	ИК-спектроскопия насыщенных углеводородов, олефиновых углеводородов, ацетиленовых углеводородов, ароматических углеводородов, галогено-органических соединений, карбонил- и гидроксилсодержащих соединений, аминов.
6	Принципы УФ-спектроскопии	Природа ЭСП (электронных спектров поглощения). Классификация электронных переходов в молекуле и их отнесение. Интенсивности полос в ЭСП и правила отбора. Концепция хромофоров, аукохромофоров и сопряженных хромофоров.

## 5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции	Практ. зан	Лаб. зан.	Семинар	СРС	Всего час.
1.	Принципы молекулярного спектрального анализа	4				1	5
2.	Принципы ИК-спектроскопии	4				1	5
3.	Принципы количественной ИК-спектроскопии	4		2		5	11
4.	Практические аспекты измерения ИК-спектров	6		2		5	13
5.	ИК-спектроскопия органических соединений	6		10		28	44
6.	Принципы УФ-спектроскопии	6				4	10
7.	УФ-спектроскопия органических соединений	6		4		10	20
	Всего	36		18		54	108

## 6. Лабораторный практикум

На лабораторном практикуме подробно изучаются способы регистрации ИК-спектров, методы построения калибровочных кривых и проведения количественного анализа, способы обработки и интерпретации ИК- и УФ-спектров.

\* Темы лабораторных работ меняются в зависимости от тематики исследовательской работы магистра.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоёмкость (час.)
1.	3	Установление зависимости концентрации аналита и интегральной интенсивности полос поглощения в инфракрасных спектрах	2
2.	4	Пробоподготовка для анализа аналита с помощью ИК-спектроскопии	2
3.	5	ИК-спектроскопия углеводородов	3
4.	5	ИК-спектроскопия карбонил- и гидроксилсодержащих соединений	3
5.	5	Самостоятельная регистрация и интерпретация ИК-спектра соединения, синтезированного студентом	4
6.	7	Пробоподготовка для анализа аналита с помощью УФ-спектроскопии	2
7.	7	УФ-спектроскопия аренов	2

**7. Практические занятия (семинары) – не предусмотрены учебным планом.**

**8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

ул. Орджоникидзе, д.3, корп. 1

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы:

ауд.№ 612 Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор BENQ MX661, проектор NEC NP40, экран моторизованный для проекторов, столы; имеется wi-fi

ул. Орджоникидзе, д.3, стр. 3

Учебно-научная лаборатория для проведения занятий лабораторного типа, индивидуальных консультаций, лаборатория спектральных методов исследования:

ауд.№ 232 Комплект специализированной мебели; технические средства: автоматизированный Фурье-спектрометр "Инфралюм" ФТ-801, компьютер, подключенный к спектрометру; компьютер, имеется выход в интернет

**9. Информационное обеспечение дисциплины**

а) Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions № 86626883 (продлевается ежегодно, программе присваивается новый номер), ISIS Draw. Интернет поисковики FireFox и Opera.

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН  
<http://lib.rudn.ru:8080/MegaPro/Web>
- База данных Scopus  
<https://www.scopus.com/>
- База данных Web of Science  
[http://apps.webofknowledge.com/WOS\\_GeneralSearch\\_input.do?product=WOS&search\\_mode=GeneralSearch&SID=N1cZ3JYEClUJdm14VTK&preferencesSaved=](http://apps.webofknowledge.com/WOS_GeneralSearch_input.do?product=WOS&search_mode=GeneralSearch&SID=N1cZ3JYEClUJdm14VTK&preferencesSaved=)
- Organic Chemistry Portal  
<http://www.organic-chemistry.org/>
- База данных Reaxys  
<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/search.do>
- Методические материалы на сайте ТУИС (рабочая программы курса, лекционные материалы, методическое обеспечение лабораторных занятий, материалы для подготовки к аттестационным испытаниям).

## **10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:**

а) основная литература

1. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе / Н.Г. Ярышев, Ю.Н. Медведев, М.И. Токарев и др. - Издание второе, переработанное и дополненное. - Москва : Прометей, 2015. - 196 с. : схем., ил., табл. - ISBN 978-5-9906134-6-1 ;

2. Луков, В.В. Физические методы исследования в химии : учебное пособие / В.В. Луков, И.Н. Щербаков. - Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2016. - 216 с. : схем., табл., ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9275-2023-7

б) дополнительная литература

1. Бёккер, Ю. Спектроскопия / Ю. Бёккер ; пер. Л.Н. Казанцева. - Москва : РИЦ "Техносфера", 2009. - 528 с. - (Мир химии). - ISBN 978-5-94836-220-5

## **11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Условия и критерии выставления оценок: от студентов требуется посещение лекций и лабораторных занятий, обязательное участие в аттестационно-тестовых испытаниях, выполнение заданий преподавателя. Для оценки текущих контрольных работ и итогового контроля применяется балльно-рейтинговая система оценки знаний.

**Лекции:**

Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; пометить важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации.

### ***Подготовка к итоговой аттестации***

При подготовке к итоговому контролю необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу.

### ***Методические указания и рекомендации по выполнению лабораторных работ.***

Рекомендации к выполнению лабораторной работы № 1-7.

Подготовка к работе:

- а) изучение теоретических основ работы по разделам учебника, указанным в описании;
- б) ознакомление с предстоящей работой по ее описанию и составление плана эксперимента;
- в) выписать из учебника или справочника значения количественных величин, которые понадобятся для расчетов;
- г) выписать в лабораторный журнал - форму лабораторного отчета, заполнив те разделы, которые могут быть заполнены до выполнения эксперимента;
- д) письменно ответить на контрольные вопросы.

Выполнение работы в лаборатории.

Внимательно изучить «специальные правила работы в химической лаборатории» и «Правила техники безопасности», вывешенные на лабораторном стенде (или имеющиеся в лаборатории) и неукоснительно их соблюдать:

- а) соблюдать чистоту и порядок на рабочем месте;
- б) перед началом работы проверьте по списку, приведенному в описании работы, наличие на вашем рабочем месте необходимого оборудования и реактивов; убедитесь в чистоте химической посуды, пипеток, кювет, шприцов и реактивов, прессформ при необходимости вымойте посуду;
- в) взяв с полки реагент и отобрав нужное количество, поставьте его на место; в конце работы приведите рабочее место в первоначальный порядок, расставив все по местам.

Правила работы студентов в лаборатории молекулярной спектроскопии.

- а) студенты допускаются к работе в лаборатории только после прохождения инструктажа по технике безопасности;
- б) нельзя заходить в помещение, где размещены спектрофотометры, без преподавателя или лаборанта;
- в) включать и выключать спектрофотометры, а также производить какие-либо манипуляции возле работающих приборов можно только в присутствии преподавателя или лаборанта;
- г) при приготовлении образцов для анализа необходимо соблюдать правила работы и техники безопасности, принятые при работе с химическими реактивами в химических лабораториях: работать в халате, пользоваться резиновыми перчатками и при включенной вентиляции.

Порядок выполнения работы.

- а) ознакомьтесь с устройством инфракрасного спектрофотометра Инфралюм-800Т, в том числе изучите: принципиальную схему устройства спектрофотометра Инфралюм-800Т; основные блоки спектрофотометра; принцип их работы, назначение; правила включения и выключения спектрофотометра, регулирование режима его работы; регистрирующую часть спектрометра; заправку регистрационной бумаги.
- б) изучите оптическую схему прибора;
- в) изучите теоретическую часть описания прибора;
- г) зарисуйте схему устройства прибора Инфралюм-800Т;
- д) запишите его основные характеристики и оптимальные параметры записи спектров на нем.

Знакомство с техникой приготовления образцов.

- а) ознакомьтесь с инструкцией по приготовлению жидких и твердых образцов;



- б) изучите способ приготовления образцов в виде таблеток, суспензий в вазелиновом масле и пленок;
- в) ознакомьтесь с устройством пресс-формы РW-20 и прессы;
- г) познакомьтесь с особенностями техники приготовления образцов в виде растворов.

#### ***Правила оформления работы в лабораторном журнале.***

1. Название работы.
2. Цель работы.
3. Краткое теоретическое введение (основные законы и формулы, уравнения или графики, относящиеся к теме лабораторной работы).
4. Экспериментальная часть:
  - список реактивов и оборудования;
  - схема прибора или установки;
  - конкретное задание на лабораторную работу;
  - условия проведения эксперимента (температура, концентрации растворов, длины волн и т.д.);
  - результаты измерений в виде таблиц и графиков;
  - расчёты по экспериментальным данным;
  - оценка погрешности измерений.
5. Выводы или заключение о результатах данной лабораторной работы.
6. Ответы на вопросы к защите лабораторной работы.
- 7.

#### **Примечание.**

*Все записи в тетради должны быть выполнены чернилами, графики – на миллиметровой бумаге только карандашом. Каждый график должен быть озаглавлен и вклеен в тетрадь.*

#### ***Правила написания и оформления контрольных работ***

- Контрольные работы выполняются в отдельной ученической тетради, на обложке которой указаны название дисциплины, фамилию и инициалы, специальность, курс. Перед каждой контрольной работой указывается номер контрольной работы, вариант задания, дата.
- Решение задачи должно сопровождаться составлением таблиц с отнесением полос поглощения в спектре к соответствующим группам соединения
- При выполнении тестовых работ студентам разрешается использование справочной литературы.

## **12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)**

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Молекулярный спектральный анализ» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

### **Разработчики:**

доцент,  
кафедры органической химии



Борисов Р. С.

**Руководитель программы**  
профессор,  
кафедры органической химии



Варламов А. В.

**Заведующий кафедрой**  
органической химии



Воскресенский Л. Г.