

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

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-Беера. 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=
- 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.