

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Талюцкий Д.А.


КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ДЕПАРТАМЕНТ
ОБРАЗОВАНИЯ
(ДО КФУ)

20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы и практическое применение спектральных методов Б1.В.ОД.5

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Физико-химические методы исследования в химии

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Седов И.А.

Рецензент(ы):

Горбачук В.В.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__ г

Регистрационный No 7135017

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) старший научный сотрудник, к.н. Седов И.А. НИЛ
Лаборатория синтетических физиологически активных веществ Химический институт им. А.М.
Бутлерова, Igor.Sedov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Формирование профессиональных компетенций в области физической химии, необходимые для реализации научно-исследовательской, производственно-технологической и педагогической деятельности. Формирование у студентов теоретической базы, необходимой для проведения научных и прикладных исследований, навыков работы с современными компьютерными программами.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ОД.5 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел 'Б1.В.ДВ.1.1 Дисциплины (модули)' вариативной части образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Общенаучный цикл Б1, его вариативная часть Б1.В.ДВ.1.1. Опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: физическая химия, неорганическая химия, органическая химия, квантовая химия.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	Должен обладать способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОК-3 (общекультурные компетенции)	Должен обладать готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	Должен обладать способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Должен обладать владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

В результате освоения дисциплины студент:

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания в различных областях химии и химической технологии

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии	2	1	2	0	0	Устный опрос
2.	Тема 2. Основы инфракрасной спектроскопии	2	2-4	2	6	0	Устный опрос Проверка практических навыков
3.	Тема 3. Основы спектроскопии в УФ- и видимой областях	2	5-7	2	4	0	Устный опрос
4.	Тема 4. Основы ЯМР-спектроскопии	2	8-11	2	4	0	Устный опрос
5.	Тема 5. Применение спектральных методов в физической и биофизической химии	2	12-14	2	4	0	Проверка практических навыков Устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	Зачет
	Итого			10	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Природа спектральных линий поглощения и испускания. Основные характеристики излучения.

Классификация методов спектроскопии по энергии излучения и типам переходов.

Разновидности электронной спектроскопии. Закон Ламберта-Бера. Колебательная спектроскопия, инфракрасные и рамановские спектры. Микроволновая спектроскопия.

Общие сведения о ЯМР-спектроскопии. Характеристическое время спектральных методов.

Тема 2. Основы инфракрасной спектроскопии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Теория колебательных спектров. Гармонические и ангармонические колебания. Силовая постоянная. Интенсивность и форма полос поглощения. Нормальные колебания нелинейных и линейных молекул. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы. Симметрия колебаний.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Правила отбора для ИК- и КР-спектров. Расчет колебательных спектров. Характеристичность частот, область ?отпечатков пальцев?. Влияние различных факторов на положение частот.

Тема 3. Основы спектроскопии в УФ- и видимой областях

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Термы многоэлектронных атомов и их обозначения. Молекулярные термы. Электронные переходы, их классификация и правила отбора. Колебательная и вращательная структура спектров. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Спектры различных классов органических соединений. Спектры сопряженных систем. Спектроскопия кругового дихроизма. Устройство и работа спектрофотометров, спектрофлуориметров и спектрометров кругового дихроизма.

Тема 4. Основы ЯМР-спектроскопии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Магнитный момент ядра и его взаимодействие с магнитным полем. Условие ядерно-магнитного резонанса. Устройство ЯМР-спектрометров. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Эталоны в ЯМР. Интенсивность сигнала ЯМР. Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР. Химические сдвиги протонов в различных структурных фрагментах органических соединений. Классификация спиновых систем. Двумерная ЯМР-спектроскопия, методики COSY, NOESY, EXSY.

Тема 5. Применение спектральных методов в физической и биофизической химии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Области применения спектральных методов. Изучение констант диссоциации и комплексообразования с помощью спектрофотометрии и спектрофлуориметрии.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Характеристика вторичной и третичной структуры белка методами ИК-спектроскопии, спектроскопии кругового дихроизма, одно- и двумерной ЯМР-спектроскопии. Обнаружение и исследование водородных связей в ИК-спектрах. Применение ИК- и КР- спектроскопии в конформационном анализе.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии	2	1	подготовка к устному опросу	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Основы инфракрасной спектроскопии	2	2-4		5	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	5	устный опрос
3.	Тема 3. Основы спектроскопии в УФ- и видимой областях	2	5-7	подготовка к устному опросу	10	устный опрос
4.	Тема 4. Основы ЯМР-спектроскопии	2	8-11	подготовка к устному опросу	10	устный опрос
5.	Тема 5. Применение спектральных методов в физической и биофизической химии	2	12-14		5	проверка практических навыков
				подготовка к устному опросу	5	устный опрос
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

используется балльно-рейтинговая система, выполняются практические работы на компьютерах, проводится разбор и анализ результатов расчетов для различных систем

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Теоретические основы атомной и молекулярной спектроскопии

устный опрос , примерные вопросы:

Классификация спектроскопических методов по длине волны излучения. Основные виды энергетических переходов. Электронные спектры. Закон Ламберта-Бера. Виды колебаний и колебательных переходов. Вращательные спектры. Колебательно-вращательное взаимодействие. Ядерный магнитный резонанс.

Тема 2. Основы инфракрасной спектроскопии

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Регистрация ИК-спектров органических молекул

устный опрос , примерные вопросы:

Виды колебаний молекул. Интенсивность и форма полос поглощения. Нормальные колебания нелинейных и линейных молекул. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы. Симметрия колебаний. Правила отбора для ИК и КР спектров. Влияние различных факторов на положение частот.

Тема 3. Основы спектроскопии в УФ- и видимой областях

устный опрос , примерные вопросы:

Термы многоэлектронных атомов и их обозначения. Молекулярные термы. Электронные переходы, их классификация и правила отбора. Колебательная и вращательная структура спектров. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах. Спектры различных классов органических соединений. Спектры сопряженных систем. Спектроскопия кругового дихроизма. Устройство и работа спектрофотометров, спектрофлуориметров и спектрометров кругового дихроизма.

Тема 4. Основы ЯМР-спектроскопии

устный опрос , примерные вопросы:

Расщепление энергетических уровней ядер в магнитном поле. Устройство ЯМР-спектрометров. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие. Эталоны в ЯМР. Интенсивность сигнала ЯМР. Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР. Химические сдвиги протонов в различных структурных фрагментах органических соединений. Классификация спиновых систем. Двумерная ЯМР-спектроскопия.

Тема 5. Применение спектральных методов в физической и биофизической химии

проверка практических навыков , примерные вопросы:

Анализ ИК- и КД-спектров раствора белковой молекулы.

устный опрос , примерные вопросы:

Определение константы диссоциации и комплексообразования с помощью спектрофотометрии. Анализ полос Амид I и Амид II в ИК-спектре белка. Теоретические основы метода спектроскопии кругового дихроизма. Двумерная ЯМР-спектроскопия. Влияние водородных связей на вид ИК-спектров.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Классификация методов спектроскопии
2. Микроволновая спектроскопия.
3. Характеристическое время спектральных методов.
4. Правила отбора в электронных и инфракрасных спектрах.
5. Нормальные колебания нелинейных и линейных молекул.
6. Термы многоэлектронных атомов и их обозначения
7. Электронные спектры органических молекул. Правила Физера-Вудворда
8. Расщепление энергетических уровней ядер в магнитном поле
9. Химический сдвиг и эталоны в ЯМР
10. Спин-спиновое расщепление в ЯМР
11. Двумерная ЯМР-спектроскопия.
12. Спектроскопия кругового дихроизма
13. Спектральные методы в исследованиях биомакромолекул
14. Закон Ламберта-Бера.
15. Использование преобразования Фурье в спектроскопии.

7.1. Основная литература:

1. Якимова, Людмила Сергеевна. Метод УФ-спектроскопии и его применение в органической и физической химии [Текст: электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л. С. Якимова ; Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова, Каф. орган. химии .? Электронные данные (1 файл: 0,67 Мб) .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .? Загл. с экрана .? Для 2-го семестра .? Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2015 .? Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ .? <URL:http://libweb.kpfu.ru/ebooks/07-ICH/07_54_000903.pdf>.
2. Каратаева Ф.Х., Ключков В.В. Спектроскопия ЯМР в органической химии. Часть I. [Электронный ресурс], 2013.(Для студентов и аспирантов химического и биологического факультетов)

Режим доступа: http://kpfu.ru/publication?p_id=68614

7.2. Дополнительная литература:

1. Гельфман, М.И. Практикум по физической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2004. ? 255 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4031 ? Загл. с экрана.
2. Камалова, Дина Илевна (1966-) . Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии : учебное пособие / Д. И. Камалова, М. Х. Салахов . - Казань : Казанский государственный университет, 2009 . - 167 с.
3. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии / Л.А. Казицына, Н.Б. Куплетская. М.: - Изд. Высшая школа, 1971. - 264 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

Journal of Molecular Spectroscopy, - <http://www.sciencedirect.com/science/journal/00222852>

Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy -

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/13861425>

База данных ЯМР-спектров онлайн - http://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi

Онлайн-база данных, содержащая информацию об УФ-, ИК- и масс- спектрах соединений - <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

Расчет ЯМР-спектров онлайн - <http://www.nmrdb.org/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы и практическое применение спектральных методов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав. Персональный компьютер и проектор для демонстрации иллюстративного материала по всем разделам дисциплины и компьютерных симуляций

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Оборудование для практических работ:

УФ-спектрофотометр, ИК-спектрометр, персональные компьютеры

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Физико-химические методы исследования в химии .

Автор(ы):

Седов И.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Горбачук В.В. _____

"__" _____ 201__ г.