

государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования Московской области
университет «Дубна»
(государственный университет «Дубна»)

Факультет естественных и инженерных наук
Кафедра химии, новых технологий и материалов



УТВЕРЖДАЮ

И.о. проректора по учебно-методической и научной работе
/С.В. Моржухина/

«09» 12 2014 г.

Рабочая программа дисциплины

Молекулярная спектроскопия

наименование дисциплины (модуля)

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Уровень высшего образования:

Бакалавриат

Направленность (профиль) программы:

Физическая химия

Форма обучения очная

Дубна, 2014

преподаватели:
Моржухина С.В., канд.хим.наук, доцент, кафедра химии, новых технологий и материалов



(подпись)

Рабочая программа разработана в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки высшего образования 04.03.01. Химия

Программа рассмотрена на заседании кафедры химии, новых технологий и материалов

Протокол заседания № 9 от «05» 12 2014 г.

Заведующий кафедрой  С.В. Моржухина
(Фамилия И.О., подпись)

1. Цели и задачи освоения дисциплины (модуля)

Цель дисциплины - углубленное изучение теоретических и методологических основ современной молекулярной спектроскопии.

Основные задачи дисциплины - изучение разделов: физика молекул, возбужденные состояния молекул, электронные, вращательные и колебательные термы молекул, спектры двухатомных и многоатомных молекул, сплошные и диффузные спектры, приложения молекулярной спектроскопии, техника и методы молекулярной спектроскопии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с созданием представления о современном состоянии и перспективах развития методов молекулярной спектроскопии, и их практическом применении в анализе веществ.

При составлении программы спецкурса основное внимание уделено тому, чтобы его содержание соответствовало современному состоянию теории и практики химии

2. Объекты профессиональной деятельности при изучении дисциплины (модуля)

Объектами профессиональной деятельности в рамках изучаемой дисциплины (модуля) являются: химические элементы, простые молекулы и сложные соединения в различном агрегатном состоянии (неорганические и органические вещества и материалы на их основе), полученные в результате химического синтеза (лабораторного, промышленного) или выделенные из природных объектов

3. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.

Изучению курса должно предшествовать изучение дисциплин:

- неорганическая химия;
- аналитическая химия;
- теория вероятностей и математическая статистика
- информационные технологии в химии
- физика
- обработка результатов химического эксперимента
- математические методы в химии

Изучение дисциплины дает основу для изучения как последующих курсов химического профиля:

- выполнение курсовых работ по органической и физической химии
- выполнение работ в рамках производственной и преддипломной практик, ВКР, НИР.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

ПК-1 понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности;

ПК-2 владеет основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии);

ПК-3 – способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных

ПК-6 владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов;

ПК-7 имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях

5. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Объем дисциплины составляет 3 зачетных единиц, всего 108 часов, из которых:

51 час составляет контактная работа обучающегося с преподавателем

17 часов – лекционные занятия;

17 часов – лабораторные работы

17 часов – практические занятия, включая мероприятия текущего контроля успеваемости, мероприятия промежуточной аттестации (зачет с оценкой).

57 часа составляет самостоятельная работа обучающегося

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля) Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе:								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы, из них		
		Лекционные занятия	Семинарские занятия	Практические занятия	Лабораторные занятия	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка к практической работе.	Всего
5 семестр										
введение. Область молекулярной спектроскопии. Физические свойства света.	10	2		1	1	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	4	2	4	6
строение молекул. Связь со спектральными характеристиками	12	2		2	2	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	6	2	4	6
УФ-спектроскопия	12	2		2	2	устный опрос в конце лекции. Выполнение домашней практической работы. Защита домашней практической работы, защита лабораторной работы	6	2	4	6
Спектрофотокolorиметрия	12	2		2	2	контрольная работа № 1	6	2	4	6
спектрофлуориметрия	12	2		2	2	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	6	2	4	6
ИК-спектроскопия	12	2		2	2	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	6	2	4	6
спектроскопия комбинационного рассеяния	12	2		2	2	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	6	2	4	6
метрология молекулярной спектроскопии	12	2		2	2	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	6	2	4	6

анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии	14	1		2	2	устный опрос в конце лекции. Защита практической работы, защита лабораторной работы	5	2	4	9
Промежуточная аттестация зачет с оценкой									X	
Итого	108	17		17	17		51			57

**Текущий контроль успеваемости может быть реализован в рамках занятий семинарского типа, групповых или индивидуальных консультаций.*

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю) и методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модулю)

Изучение дисциплины предусматривает выполнение практических работ в специальных практикуме по Спектроскопическим методам анализа

Методические указания к практическим занятиям

Практические занятия призваны закрепить теоретические знания студентов и познакомить их с методами решения конкретных задач, возникающих при практическом применении химических знаний.

№ раздела дисциплины	Наименование практических занятий (семинаров)
Область молекулярной спектроскопии. Физические свойства света.	природа спектров. Электронные спектры молекул.
строение молекул. Связь со спектральными характеристиками	Вращательные спектры. Колебательные спектры
УФ-спектроскопия	УФ-спектры органических веществ.
Спектрофотокolorиметрия	Выбор оптимальных условия для фотометрирования. контрольная работа № 1
спектрофлуориметрия	анализ смеси красителей методом спектрофлуориметрии. разделение спектров флуоресценции при их наложении
ИК-спектроскопия	пробоподготовка для ИК-спектроскопии. анализ пленок ИК-спектроскопией
спектроскопия комбинационного рассеяния	анализ солей и органических веществ методом СКР

Методические материалы по теории и технике эксперимента для практических работ, перечень контрольных вопросов и заданий изложены в методических разработках, которые выдаются студентам в электронном виде перед каждой работой:

1. Фадейкина И.Н., Полотнянко Н.А. Инфракрасная спектроскопия с Фурье преобразованием
2. Моржухина С.В., Кузьмина О.К. Флюориметрия
3. Моржухина С.В. Исследование строение веществ и их идентификация методом спектроскопии комбинационного рассеяния
4. Моржухина С.В. Электронная спектроскопия

Методические указания к лабораторным работам

№ раздела дисциплины	Наименование
УФ-спектроскопия	УФ-спектры органических веществ.
Спектрофотокolorиметрия	Выбор оптимальных условия для фотометрирования. контрольная работа № 1
спектрофлуориметрия	анализ смеси красителей методом спектрофлуориметрии. разделение спектров флуоресценции при их наложении
ИК-спектроскопия	пробоподготовка для ИК-спектроскопии. анализ пленок ИК-спектроскопией
спектроскопия комбинационного рассеяния	анализ солей и органических веществ методом СКР

метрология молекулярной спектроскопии	анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии
анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии	анализ реальных объектов методами молекулярной спектроскопии

Методические материалы по теории и технике эксперимента для практических работ, перечень контрольных вопросов и заданий изложены в методических разработках, которые выдаются студентам в электронном виде перед каждой работой:

5. Фадейкина И.Н., Полотнянко Н.А. Инфракрасная спектроскопия с Фурье преобразованием
6. Моржухина С.В., Кузьмина О.К. Флюориметрия
7. Моржухина С.В. Исследование строения веществ и их идентификация методом спектроскопии комбинационного рассеяния
8. Моржухина С.В. Электронная спектроскопия

Методические материалы для преподавателей

Методическая модель преподавания дисциплины основана на применении активных методов обучения. Принципами организации учебного процесса являются:

- активное участие обучающихся в учебном процессе;
- проведение практических занятий, определяющих приобретение навыков решения проблем;
- приведение примеров применения изучаемого теоретического материала к реальным практическим ситуациям.

Используемые методы преподавания: лекционные занятия с использованием мультимедиа презентаций, индивидуальные и групповые задания при проведении практических занятий. Индивидуальные задания подбираются студентам с учетом их работы над темами НИР.

Для более глубокого изучения предмета преподаватель предоставляет студентам информацию о возможности использования Интернет-ресурсов по разделам дисциплины.

При наличии академических задолженностей по практическим занятиям, связанных с их пропусками преподаватель вправе выдать задание студенту в виде реферата по пропущенной теме занятия.

Методические материалы по организации самостоятельной работы студентов

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов в объеме 74 часа, из них часть часов отводится на выполнение работ по индивидуальному заданию.

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- изучение отдельных разделов тем дисциплины
- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к практическим занятиям;
- выполнение индивидуальных практических домашних работ с последующей их защитой
- работу с Интернет-источниками.

Программой дисциплины предусмотрено выполнение практических работ. Для выполнения практических работ необходимо получить у преподавателя индивидуальное зада-

ние, произвести все необходимые расчеты, получить допуск к работе. После выполнения практической работы необходимо оформить отчет и защитить практическую работу.

Кроме этого, запланировано выполнение работ по индивидуальным заданиям. Каждое задание после выполнения работы необходимо защитить.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе.

По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

8. Применяемые образовательные технологии для различных видов учебных занятий и для контроля освоения обучающимися запланированных результатов обучения

В учебном процессе, помимо чтения лекций, широко используются активные и интерактивные формы (обсуждение отдельных разделов дисциплины в рамках устных опросов на лекциях, выполнение практических заданий в группах, защита выполненных практических заданий, выполнение индивидуальных практических домашних работ с последующей их защитой). В сочетании с внеаудиторной работой это способствует формированию и развитию профессиональных навыков обучающихся.

Перечень обязательных видов работы студента:

- посещение лекционных занятий;
- участие в дискуссии в рамках устных опросов на лекциях;
- ответы на теоретические вопросы на практических занятиях;
- выполнение практических заданий и лабораторных работ и их защита;
- выполнение в группах практических работ;
- выполнение индивидуальных практических домашних работ
- защита индивидуальных практических домашних работ

Инновационные формы проведения учебных занятий

Семестр	Вид учебных занятий	Используемые инновационные формы проведения учебных занятий	Количество академ. часов
6	Лекционные занятия	Проблемная технология,	6
	Практические занятия	Работа по индивидуальному заданию, дискуссия во время устного опроса Работа в группах Выполнение групповой практической и лабораторной работы Допуск к практической и лабораторной работе, Защита практической и лабораторной работы,	20

Семестр	Вид учебных занятий	Используемые инновационные формы проведения учебных занятий	Количество академ. часов
Всего:			26

При изучении теоретического курса на лекциях предусматривается изложение материала в виде презентации. Отдельные лекции излагаются по проблемной технологии.

Некоторые разделы теоретического курса изучаются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задания на ознакомление с новым материалом до его изложения на лекциях.

При прохождении практических занятий студентам предлагается работать в малых группах: учебная группа разбивается на несколько небольших групп – по 2-3 человека.

Каждая группа выполняет задание. Процесс выполнения заданий осуществляется на основе обмена мнениями и выбора оптимального пути решения.

На основании полученных данных по всем опытам каждый студент заполняет свой отчет, где записывает результаты, составляет уравнения реакций химических процессов, производит соответствующие расчеты.

На собеседовании с преподавателем студент представляет оформленный отчет по данной работе и отвечает на вопросы преподавателя, связанные с методикой работы, результатами и выводами. По ряду работ предусматривается применение метода «защиты».

Групповая работа в практикуме стимулирует согласованное взаимодействие между студентами, отношения взаимной ответственности и сотрудничества. При формировании групп учитывается два признака: степень химической подготовленности студентов и характер межличностных отношений. В ряде случаев студентам самим предлагается разбиться на группы, состав которых впоследствии может корректироваться для повышения качества работы.

В практикуме при выполнении отдельных опытов используется метод проблемного обучения: студент получает задание, методику которого он должен подобрать самостоятельно, обсудить ее с преподавателем и затем приступить к его выполнению.

Курс сопровождается практическими занятиями в студенческом химическом практикуме, основная цель которых – закрепление теоретических знаний, а также получение практических навыков. Организация практических работ проводится таким образом, чтобы студенты научились самостоятельно решать поставленные задачи путем проведения экспериментальных исследований и квалифицированной обработкой полученных результатов.

9. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине

• Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования

Полный перечень компетенций выпускников образовательной программы «Химия. Физическая химия» с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования приведен в картах компетенций образовательной программы.

Перечень компетенций выпускников образовательной программы «Химия. Физическая химия», в формировании которых участвует данная дисциплина представлен в разделе 4 ра-

бочей программы дисциплины. Указание результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы формирования компетенций, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования представлено ниже.

- **Описание шкал оценивания**

При проведении промежуточной аттестации по дисциплине в форме зачета с оценкой используется пятибалльная система оценивания.

Описание шкал оценивания для различных заданий, выполняемых в рамках текущего контроля, представлено в методических материалах, определяющих процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

- **Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций**

Материалы для промежуточной аттестации

перечень вопросов, выносимых на зачет

1. Понятие спектральных методов анализа. Прямая и обратная задача физического метода исследования. Виды электромагнитного излучения. Основные характеристики электромагнитного излучения. Свойства света.
2. Электромагнитный спектр. Постулаты Бора. Виды взаимодействия света с веществом. Виды спектров. Виды спектральных методов анализа. Виды исследований в спектроскопии.
3. Происхождение спектров. Система энергетических состояний атома и атомные спектры. Выводы из постулатов Бора. Правила отбора электронных переходов в атоме.
4. Потенциальная кривая молекулы водорода.
5. Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля. Примеры строения молекул двухатомных и сложных органических.
6. Энергия молекул. Описание уровней энергии в двухатомной молекуле. Квантовомеханическая модель электронных колебательных и вращательных уровней в двухатомной молекуле. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Связь со спектрами.
7. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Потенциальные кривые, построенные по обоим моделям. Возможные переходы и связь со спектрами.
8. Спектры молекул. Возможные типы переходов молекул из одних энергетических состояний в другие.
9. Взаимодействие излучения с веществом. Однофотонные и двухфотонные переходы.
10. Спектральные линии.
11. Правила отбора для двухатомных молекул.
12. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
13. вращательные спектры двухатомных молекул
14. Электронно-колебательно- вращательные спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.
15. Энергетические состояния многоатомных молекул.

Примеры билетов для зачета

Билет №1

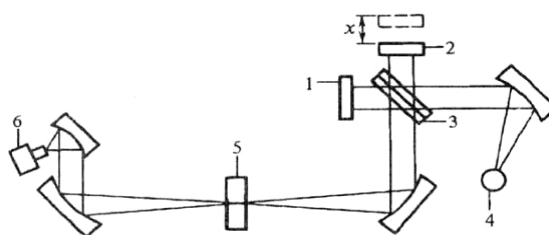
1. Колебательные спектры возникают при взаимодействии вещества :

1) с гамма-излучением; 2) с видимым светом ; 3) с радиоволнами

- 4) с ИК-излучением ; 5) с УФ-излучением
2. Комбинационным рассеянием называется рассеяние света :
- 1) без изменения частоты; 2) с увеличением частоты;
 - 3) с уменьшением частоты ; 4) с изменением частоты.
3. Сколько поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы у линейной молекулы HCN и угловой — H₂O ? Одинаково ли у них число основных частот колебаний ?
4. Укажите характерные особенности колебательных спектров (ИК- и КР-) приведенных ниже молекул: HCl
5. Какие основные изменения произойдут в инфракрасном спектре поглощения циклопентанона после его обработки этиленгликолем в кислой среде ?
6. Какие признаки положены в основу деления шкалы электромагнитных волн на диапазоны и каковы особенности оптического диапазона?
7. В каких областях спектра наблюдаются электронно-колебательно-вращательные, колебательно-вращательные и вращательные спектры?
8. В каких областях спектра проявляются переходы между электронными, колебательными и вращательными состояниями молекул ?
- 1) Колебательные — в ИК-области, вращательные — в УФ-области, электронные — в микроволновой.
 - 2) Колебательные — в микроволновой, электронные — в УФ-области, вращательные — в ИК-области.
 - 3) Колебательные — в ИК-области, вращательные — в микроволновой, электронные — в УФ-области.
 - 4) Колебательные — в УФ-области, электронные — в ИК-области, вращательные — в микроволновой.
9. . Спектрам поглощения в ультрафиолетовой области спектра соответствуют :
- 1) электронные переходы из основного в возбужденное состояние;
 - 2) колебательные переходы из основного в возбужденное состояние;
 - 3) электронные переходы из возбужденного в основное состояние ;
 - 4) вращательные переходы из основного в возбужденное состояние.
- 10 Какие электронные переходы запрещены по спину :
- 1) синглет-синглетные ; 2) синглет-триплетные ; 3) триплет-триплетные ; 4) для электронных переходов нет запрета по спину.

11. **Оптическая схема Фурье-спектрометра**

Найдите соответствие:



Название	Номер
неподвижное зеркало интерферометра	
подвижное зеркало	
светоделительная пластина (светоделитель)	
источник излучения	
исследуемый образец	
детектор излучения	

12. Классы веществ, ИК-спектры которых или нельзя получить, или они являются неинформативными (выберите несколько ответов):
- А) металлы
 - Б) кислородсодержащие соли редкоземельных элементов
 - В) инертные газы
 - Г) неполярные органические молекулы с молекулярной массой меньше 100 а.е.м.
 - Д) оксиды переходных металлов

Е) гетероциклические органические соединения с сопряженными связями

Ж) неорганические соли без ковалентных связей (например, NaCl)

13. Электронные спектры поглощения метиловых эфиров бензойной и фенилуксусной кислот имеют в интервале 220 – 350 нм имеют один максимум: при 260 нм ($\lg \epsilon \sim 2,2$) — спектр А и при 285 нм ($\lg \epsilon \sim 3,1$) — спектр Б. Какому веществу соответствует каждый спектр ?

14. эффект обуславливает смещение полосы $n \rightarrow \sigma^*$ триэтиламин bathochromно (217 нм) по сравнению с метиламином, см табл. ниже (задание дает преподаватель).

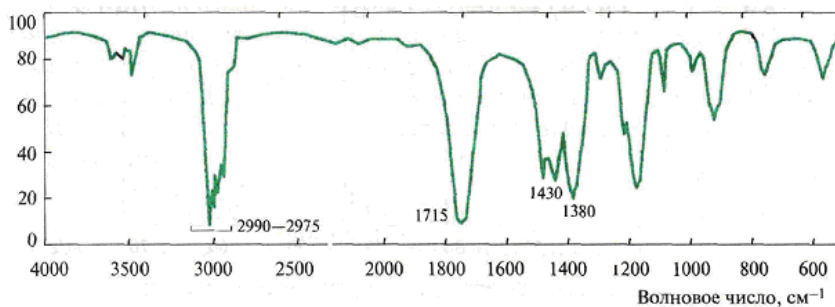
Соединение	λ , нм ($\lg \epsilon$) $\sigma \rightarrow \sigma^*$	λ , нм ($\lg \epsilon$) $n \rightarrow \sigma^*$
CH ₃ OH	150	183 (2,18)
(CH ₃) ₂ O	150	184 (3,0)
C ₂ H ₅ SH	192 (3,9)	225 (2,2)
(CH ₃) ₂ S	210 (2,0)	229 (2,2)
R-S-S-R	200	250 (2,5)
CH ₃ NH ₂	173	213 (2,3)
(C ₂ H ₅) ₃ N	199	227 (2,90)
CH ₃ Cl	150	173 (2,30)
CH ₃ Br	—	204 (2,30)
CH ₃ I	150—210	258 (3,50)

15. На основе таблицы для дизамещенных бензола (см. ниже) рассмотрите отнесение полос к электронным переходам, например орто-нитрофенола (задание дает преподаватель).

X	Y	Положение заместителей	$\lambda_{\text{макс}}$, нм ($\lg \epsilon$)	
ОН	ОН	1,2	214 (3,80),	276 (3,36)
ОН	ОН	1,3	216 (3,83),	274 (3,30)
ОН	ОН	1,4	225 (3,78),	295 (3,49)
ОН	NO ²	1,2	230 (3,59),	278 (3,81),
ОН	NO ²	1,3	274 (3,78),	333 (3,29)
ОМеСНО		1,2	254 (4,00),	322 (3,66)
ОМеСНО		1,3	252 (3,92),	314 (3,45)
NH ²	NO ²	1,2	229 (4,20),	275 (3,70),
NH ²	NO ²	1,3	235 (4,20),	373 (3,18)
COOH	COOH	1,2	230 (3,96),	280 (3,02)
COOH	COOH	1,3	230 (4,08),	282 (2,98)

16. Какие характерные изменения произойдут в электронном спектре поглощения ацетоуксусного эфира после замены растворителя: гексана на воду

17. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой C₄H₈O.



18. Какая кювета пригодна для спектрофлуориметра и почему?

19. На чем основан флуориметрический метод анализа?

Материалы для текущего контроля

Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы:

1. Спектрам поглощения в ультрафиолетовой области спектра соответствуют :
 - 1) электронные переходы из основного в возбужденное состояние;
 - 2) колебательные переходы из основного в возбужденное состояние;
 - 3) электронные переходы из возбужденного в основное состояние ;
 - 4) вращательные переходы из основного в возбужденное состояние.
2. Электронные переходы в молекулах проявляются в ультрафиолетовой и видимой областях спектра примерно от 100 до 1000 нм. Какова энергия этих переходов в см^{-1} ?
 - 1) 10 – 100 ;
 - 2) 100 – 1000 ;
 - 3) 10000 – 100000 ;
 - 4) 10 – 100000.
3. Электронные спектры возникают при взаимодействии вещества :
 - 1) с гамма-излучением;
 - 2) с видимым светом ;
 - 3) с радиоволнами ;
 - 4) с ИК-излучением ;
 - 5) с УФ-излучением.
4. Какие электронные переходы запрещены по спину :
 - 1) синглет-синглетные ;
 - 2) синглет-триплетные ;
 - 3) триплет-триплетные ;
 - 4) для электронных переходов нет запрета по спину.
5. Какова мультиплетность электронного состояния молекулы, при котором спины двух электронов параллельны :
 - 1) $1/2$;
 - 2) 1 ;
 - 3) 2 ;
 - 4) 3.
6. Среди приведенных ниже групп найдите ауксохромы :
 - 1) $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O}$;
 - 2) $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}$;
 - 3) $-\text{NH}_2$;
 - 4) $\text{C}=\text{C}$;
 - 5) $\text{C}=\text{O}$;
 - 6) $-\text{OH}$.
7. Увеличение цепи сопряжения полиенов приводит в УФ-спектре к :
 - 1) батохромному сдвигу и гипохромному эффекту;
 - 2) батохромному сдвигу и гиперхромному эффекту;
 - 3) гипохромному сдвигу и гипохромному эффекту;
 - 4) гипохромному сдвигу и гиперхромному эффекту.
8. Видимый свет представляет собой электромагнитное излучение, занимающее интервал спектра от 400 до 800 нм. Объясните, почему многие вещества имеющие максимум поглощения ниже 400 нм интенсивно окрашены.
9. Электронные спектры поглощения бутанона-2 и бутен-3-она-2 в области 220–350 нм имеют один максимум: при 270 нм ($\epsilon \approx 17$) — спектр А и при 315 нм ($\epsilon \approx 28$) — спектр Б. Какому веществу принадлежит каждый спектр ?
10. В электронном спектре поглощения трифениламина имеется полоса при 227 нм в нейтральном растворе. Объясните, почему данная полоса исчезает в кислом растворе.
11. Можно ли по электронным спектрам поглощения контролировать течение следующих реакций : а) диеновой конденсации; б) альдольной конденсации; в) азосочетания; г) образования ацеталей; д) гидрирования аренов.
12. Оптическая плотность водного раствора соединения X при $\lambda = 250$ нм составляет 0,542 при концентрации 0,1 моль/л в кювете с толщиной поглощающего слоя 1 см. Коэффициент поглощения соединения X равен 9000. Известно, что X реагирует по уравнению: $\text{X} = \text{Y} + \text{Z}$. Найдите константу равновесия этой реакции, если известно что соединения Y и Z не поглощают в области поглощения X.
13. При гидролизе 5-метил-3-хлор-1,4-гексадиена были выделены два изомерных спирта. Электронный спектр поглощения одного из них содержит полосу при 223 нм ($\lg \epsilon = 4,4$), а другого — полосу при 236 нм ($\lg \epsilon = 4,3$). Каково их строение ?

14. При нагревании образца этилциклопентадиена ($\lambda_{\text{макс}} = 247 \text{ нм}$, $\epsilon \approx 3400$) в течении 0,5; 1,5; 2,5; 4 ч в спектре поглощения наблюдается уменьшение мольного коэффициента поглощения и составляет 2800, 2050, 1650, 1100 соответственно. Определите для каждого момента времени степень превращения этилциклопентадиена в его димер, если последний прозрачен при 247 нм.
15. Какие изменения в электронном спектре поглощения акролеина $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CHO}$ [$\lambda_{\text{макс}} = 203 \text{ нм}$ ($\epsilon \approx 12000$), $\lambda_{\text{макс}} = 345 \text{ нм}$ ($\epsilon \approx 20$)] следует ожидать при разбавлении этанолом, содержащим следы кислоты?
16. Пропускание водного раствора фумарата натрия при $\lambda = 250 \text{ нм}$ и 25°C составляет 19,2 % для $5 \cdot 10^{-4}$ моль/л раствора в кювете толщиной 1 см. Вычислите оптическую плотность и молярный коэффициент поглощения.
17. Как будет изменяться УФ-спектр поглощения фенола в водном растворе при изменении кислотности среды от сильнокислой до щелочной?
18. Для ряда линейных полициклических ароматических углеводородов общей формулы $\text{C}_n\text{H}_{0,5n+3}$ (где $n = 14, 18, 22$) в электронных спектрах поглощения имеются максимумы поглощения при 380 нм ($\epsilon \sim 7900$), 480 нм ($\epsilon \sim 11000$) и 580 нм ($\epsilon \sim 12600$). Соотнесите данные спектров с формулами кислот.
19. Электронные спектры поглощения метиловых эфиров бензойной и фенилуксусной кислот имеют в интервале 220 – 350 нм имеют один максимум: при 260 нм ($\lg \epsilon \sim 2,2$) — спектр А и при 285 нм ($\lg \epsilon \sim 3,1$) — спектр Б. Какому веществу соответствует каждый спектр?
20. Для ряда непредельных кислот $\text{CH}_3(\text{CH}=\text{CH})_n\text{COOH}$ (где $n = 2, 3, 4$) в электронных спектрах поглощения имеются максимумы поглощения при 260 нм ($\epsilon \sim 6500$), 310 нм ($\epsilon \sim 9000$) и 330 нм ($\epsilon \sim 11000$). Соотнесите данные спектров со структурами кислот.
21. Какие изменения в электронном спектре поглощения циклопропанона следует ожидать после гидратации?
22. Электронные спектры поглощения бутадиена-1,3 и гексадиена-2,4 в области 200–250 нм имеют один максимум : при 217 нм ($\epsilon \sim 21000$) — спектр А и при 227 нм ($\epsilon \sim 23000$) — спектр Б. Какому веществу принадлежит каждый спектр?
23. В каком растворителе, CCl_4 или CH_3CN , больше вероятность зарегистрировать тонкую колебательную структуру электронного перехода растворенного соединения? Почему?
24. Можно ли отличить методами оптической спектроскопии внутри- и межмолекулярную водородную связь? Аргументируйте ответ конкретными примерами.
25. В электронном спектре поглощения окиси мезитила $\text{CH}_3\text{COCH}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$ (в гептане) в области от 200 до 400 нм имеются две полосы поглощения с максимумами при $\lambda = 230 \text{ нм}$ и $\lambda = 327 \text{ нм}$, обусловленные соответственно $\pi \rightarrow \pi^*$ и $n \rightarrow \pi^*$ переходами. Объясните, какие изменения произойдут в спектре после замены гептана на более полярный растворитель.
26. Какие характерные изменения произойдут в электронном спектре поглощения ацетоуксусного эфира после замены растворителя: гексана на воду?
27. Какие изменения произойдут в УФ-спектре циклопентанона после его обработки литий-алюминийгидридом?
28. Какому из непредельных изомерных спиртов $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}$ принадлежит электронный спектр поглощения с максимумом при 223 нм ($\epsilon = 14000$)?
 - 1) $\text{CH}\equiv\text{CCH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$
 - 2) $\text{CH}\equiv\text{CCH}(\text{OH})\text{CH}=\text{CHCH}_3$
 - 3) $\text{CH}\equiv\text{CCH}=\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$
 - 4) $\text{CH}_2=\text{CHCH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$
 - 5) $\text{CH}_2=\text{CHC}(\text{CH}_3)(\text{OH})\text{C}\equiv\text{CH}$
29. По мере увеличения числа сопряженных двойных связей поглощение все более сдвигается в сторону длинных волн. Соединения А, Б, В имеют формулу C_5H_8 и при гидрировании они превращаются в н-пентан. В их УФ-спектрах имеются следующие максимумы: А — 176 нм, Б — 211 нм, В — 217 нм.

Вероятная формула соединения В.....?

Варианты ответов:

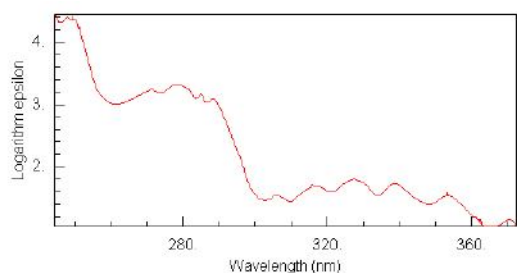
1. Пентан. 2. 2-метилбутадиен-1.3.
3. Пентен-1. 4. Пентен-2.

30. Полоса переноса заряда для изомеров о-, м-, п-диметиламино-бензальдегида находится в области 327, 262, 262 нм. Мезоформула для изомера с полосой переноса заряда в 327 нм имеет вид
31. эффект обуславливает смещение полосы $n \rightarrow \sigma^*$ триэтиламина батохромно (217 нм) по сравнению с метиламином, см табл. ниже (задание дает преподаватель).

Соединение	λ , нм (lg ϵ) $\sigma \rightarrow \sigma^*$	λ , нм (lg ϵ) $n \rightarrow \sigma^*$
CH ₃ OH	150	183 (2,18)
(CH ₃) ₂ O	150	184 (3,0)
C ₂ H ₅ SH	192 (3,9)	225 (2,2)
(CH ₃) ₂ S	210 (2,0)	229 (2,2)
R-S-S-R	200	250 (2,5)
CH ₃ NH ₂	173	213 (2,3)
(C ₂ H ₅) ₃ N	199	227 (2,90)
CH ₃ Cl	150	173 (2,30)
CH ₃ Br	—	204 (2,30)
CH ₃ I	150—210	258 (3,50)

32. Наиболее характерным поглощением для бензола является полоса в областинм с ярко выраженной колебательной структурой.

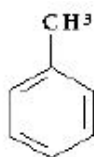
33. В спектре бензальдегида наблюдаются две полосы поглощения, относящиеся к электронным переходам (соответственно), и электронный переход $n \rightarrow \pi^*$ в области 320—350 нм и



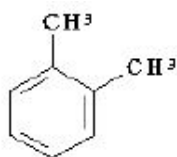
34. На основе таблицы для дизамещенных бензола (см. ниже) рассмотрите отнесение полос к электронным переходам, например орто-нитрофенола (задание дает преподаватель).

X	Y	Положение заместителей	макс, нм (lg)	
OH	OH	1,2	214 (3,80),	276 (3,36)
OH	OH	1,3	216 (3,83),	274 (3,30)
OH	OH	1,4	225(3,78),	295 (3,49)
OH	NO ²	1,2	230 (3,59),	278 (3,81), 351 (3,48)
OH	NO ²	1,3	274 (3,78),	333 (3,29)
OMeCHO		1,2	254 (4,00),	322 (3,66)
OMeCHO		1,3	252 (3,92),	314 (3,45)
NH ²	NO ²	1,2	229 (4,20),	275 (3,70), 405 (3,70)
NH ²	NO ²	1,3	235 (4,20),	373 (3,18)
COOH	COOH	1,2	230 (3,96),	280 (3,02)
COOH	COOH	1,3	230 (4,08),	282 (2,98)

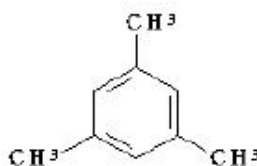
35. Расположите максимумы поглощения для соединений в соответствии с их строением (279, 263, 261, 266 нм).



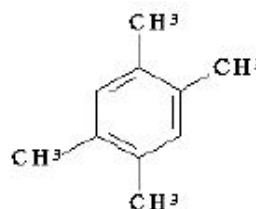
толуол



о-ксилол

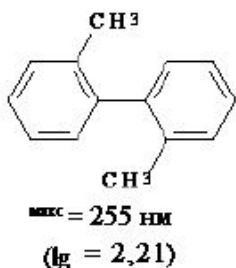


мезитилен



дурол

36. Причиной аналогии спектра рассматриваемого ниже соединения с моно-замещенными производными бензола является пространственные затруднения, обусловленные



37.. Причиной bathochromного сдвига полосы $\pi \rightarrow \pi^*$ в стироле является 248, 280 и 290 нм.....

38.. Bathochromное смещение В-полосы бензола обусловлено

39. На чем основан метод спектрофлуориметрии

40. Почему для уранина и родамина С величину $\Delta\lambda$ принять брать равной 25 нм.

41. Как проходит свет в приборе при анализе пробы.

42. По какому методу рассчитывают концентрацию шифрованной пробы.

43. В каких растворителя у родамина С устойчива лактонная форма, а в каких проявляется двойная флуоресценция.

44. Дайте оценку порядку величины электронной, колебательной и вращательной энергий

45. Что представляет собой гантельная модель вращающейся двухатомной молекулы?

46. Опишите модель гармонического осциллятора

47. Какой вид имеют волновые функции гармонического осциллятора и распределение вероятностей?

48. В чем причина ангармоничности колебаний? Каково выражение для энергии осциллятора с учетом ангармоничности?

49. Каковы правила отбора для колебательно-вращательных уровней?

50. Какова классификация молекулярных электронных состояний?

51. Сформулируйте принцип Франка-Кондона

52. Чем определяются относительные интенсивности электронно-колебательных полос?

53. Опишите колебательную структуру электронных переходов

54. Опишите вращательную структуру электронно-колебательных полос

55. В чём отличие рассеяния света от люминесценции?

56. Чем отличаются упругое и неупругое рассеяния?

57. Почему интенсивности антистоксовых линий в КР спектре меньше по сравнению с интенсивностью стоксовых линий?

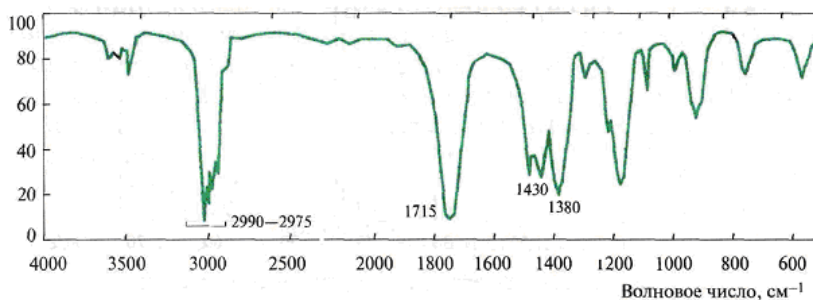
58. . На что влияет время экспозиции?

59. Почему в ИК диапазоне люминесценция обычно меньше?

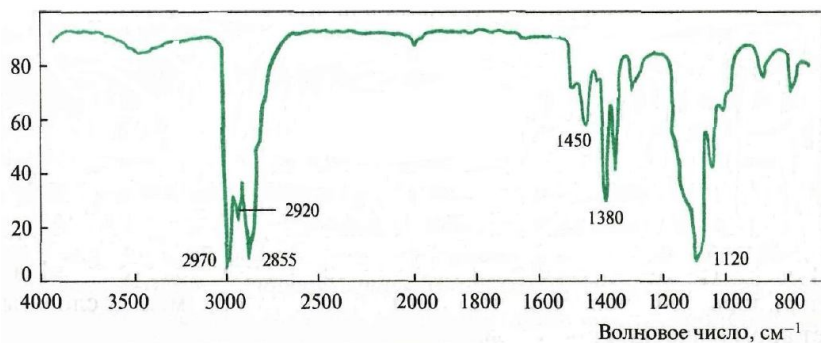
60. Объясните суть комбинационного рассеяния? Почему оно значительно слабее релеевского?

61. Если при релеевском рассеянии, рассеяние происходит мгновенно (без задержки), на той же длине волны, что же тогда меняется в фотоне?

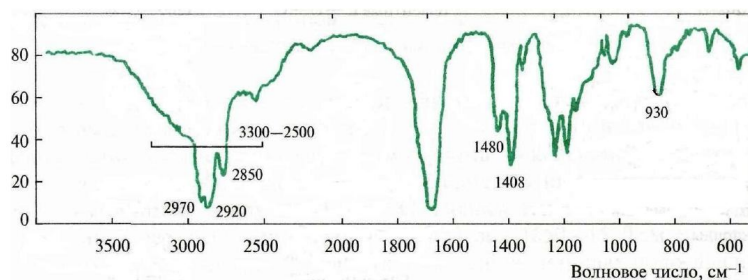
62. Почему спектр КР строится, беря за ноль длину волны лазера?
63. Почему от единиц длины волны «нм» переходят к см^{-1} ?
64. Чем метод комбинационного рассеяния отличается от метода ИК-спектроскопии? Если и там и там можно зарегистрировать, например, колебательный переход 3000см^{-1} ?
65. 4000см^{-1} это сколько в нм.
66. Из-за чего может быть затруднен анализ КРС спектра?
67. Какие основные параметры пика КРС спектра? За что они отвечают?
68. Какие колебания молекулы CO_2 проявляются в ИК-спектре, а какие в КР-спектре?
69. Сколько поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы у тетраэдрической молекулы CH_4 ?
70. Сколько поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы у линейной молекулы HCN и угловой — H_2O ? Одинаково ли у них число основных частот колебаний?
71. Укажите характерные особенности колебательных спектров (ИК- и КР-) приведенных ниже молекул:
- 1) Cl_2 ; 2) HCl ; 3) CO ;
 - 4) $\text{CF}_2=\text{CH}_2$ (только валентные колебания двойной связи) ;
 - 5) $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$ (только валентные колебания двойной связи).
72. Проявляются ли (активны ли) колебания полярных двухатомных молекул (например HCl) в ИК-спектрах и спектрах КР?
73. Предскажите вид колебательных спектров (ИК- и КР-спектров) для линейной молекулы диоксида углерода и укажите типы колебаний для данной молекулы.
74. Молекула ацетилена в основном состоянии имеет линейное строение, а в возбужденном состоянии принимает нелинейную транс-конфигурацию. Одинаково ли число основных частот колебаний этих двух состояний?
75. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$.



76. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$



77. По данным ИК-спектра, пользуясь справочными таблицами, предположите строение соединения, состав которого может быть выражен формулой $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}_2$



Примерная тематика домашних практических работ:

- расшифровка УФ-спектров
- расшифровка ИК-спектров
- расшифровка спектров комбинационного рассеяния

Методические материалы по теории и технике эксперимента для практических работ, перечень контрольных вопросов и заданий изложены в методических разработках, которые выдаются студентам в электронном виде перед каждой работой:

1. Фадейкина И.Н., Полотнянко Н.А. Инфракрасная спектроскопия с Фурье преобразованием
2. Моржухина С.В., Кузьмина О.К. Флюориметрия
3. Моржухина С.В. Исследование строения веществ и их идентификация методом спектроскопии комбинационного рассеяния
4. Моржухина С.В. Электронная спектроскопия

Содержание контрольной работы № 1

1. Понятие спектральных методов анализа. Прямая и обратная задача физического метода исследования. Виды электромагнитного излучения. Основные характеристики электромагнитного излучения. Свойства света.
2. Электромагнитный спектр. Постулаты Бора. Виды взаимодействия света с веществом. Виды спектров. Виды спектральных методов анализа. Виды исследований в спектроскопии.
3. Происхождение спектров. Система энергетических состояний атома и атомные спектры. Вырождение состояний. Правила отбора электронных переходов в атоме.
4. Потенциальная кривая молекулы водорода.
5. Метод молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля. Примеры строения молекул двухатомных и сложных органических.
6. Энергия молекул. Описание уровней энергии в двухатомной молекуле. Квантово-механическая модель электронных колебательных и вращательных уровней в двухатомной молекуле. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Связь со спектрами.
7. Модель гармонического и ангармонического осциллятора. Потенциальные кривые, построенные по обеим моделям. Возможные переходы и связь со спектрами.
8. Спектры молекул. Возможные типы переходов молекул из одних энергетических состояний в другие.
9. Взаимодействие излучения с веществом. Однофотонные и двухфотонные переходы.

10. Спектральные линии.
11. Правила отбора для двухатомных молекул.
12. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
13. вращательные спектры двухатомных молекул
14. Электронно-колебательно- вращательные спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.
15. Энергетические состояния многоатомных молекул.

Пример варианта задания на контрольной работе № 1

Вариант 1

1. Энергия молекул. Описание уровней энергии в двухатомной молекуле. Квантово-механическая модель электронных колебательных и вращательных уровней в двухатомной молекуле. Энергетические уровни двухатомной молекулы. Связь со спектрами.
2. Правила отбора для двухатомных молекул. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.
3. Чем определяются относительные интенсивности электронно-колебательных полос?
- 4.. Электромагнитный спектр. Постулаты Бора. Виды взаимодействия света с веществом. Виды спектров. Виды спектральных методов анализа. Виды исследований в спектроскопии.
5. Почему интенсивности антистоксовых линий в КР спектре меньше по сравнению с интенсивностью стоксовых линий?
6. Проявляются ли (активны ли) колебания полярных двухатомных молекул (например HCl) в ИК-спектрах и спектрах КР?

- **Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Для контроля знаний студентов по данной дисциплине необходимо проводить текущий и промежуточный контроль.

Текущий контроль выполняется в виде приема допусков и защит практических работ, устного опроса на лекциях и практических занятиях, выполнения контрольной работы.

Промежуточный контроль проводится в виде зачета с оценкой, на котором обсуждаются теоретические и практические вопросы курса. Практическая часть частично зачитывается по результатам работ, выполненным в семестре, на основе балльно-рейтинговой системы. При рейтинговой системе все знания, умения и навыки, приобретаемые студентами в результате изучения дисциплины, оцениваются в баллах.

Оценка качества работы в рейтинговой системе является накопительной и используется для оценивания системной работы студентов в течение всего периода обучения. Максимально-возможная сумма баллов по всем видам заданий приравнивается 100 %. При этом также учитывается посещаемость занятий – 0,5 балла за посещение одного занятия продолжительностью 1 академический час, при этом максимальный балл за посещаемость равен 17. Каждое практическое задание оценивается в зависимости от сложности от 1 до 10 баллов. Окончательно задания формируются перед началом семестра преподавателем в зависимости от тем НИР студентов. Максимальный балл за каждый вид задания определяется преподава-

телем в зависимости от уровня сложности задания в начале семестра, проставляется в журнале успеваемости и доводится до сведения студентов.

Чтобы быть допущенным к зачету, студент обязан проделать и сдать **все** практические работы. Работы, пропущенные без уважительной причины, а также работы, не защищенные студентом в течение 2х недель после проведения практической части, оцениваются преподавателем с понижающим коэффициентом 0,5.

Преподаватель может использовать «**штрафы**» в виде уменьшения набранных баллов за пропуск лекционных занятий, за нарушение сроков выполнения учебной работы, за систематический отказ отвечать на семинарских занятиях и т.д.

Результаты работы студентов фиксируются преподавателем в журнале успеваемости. В течение семестра проводится 2 промежуточные аттестации, о результатах которых преподаватель сообщает студенту, куратору группы и заведующему кафедрой.

Если к моменту окончания семестра студент набирает не менее 55 % от максимальной возможной суммы баллов, то он получает допуск к зачету.

Студент, сдающий зачет, получает баллы за зачетное задание.

Если к началу зачетной недели набранное студентом суммарное количество баллов с учетом дополнительных, составляет **менее 55 % от максимальной суммы баллов**, он не допускается к сдаче зачета. Такие студенты могут довести свой балл до необходимой суммы в течение последней (зачетной) недели семестра, написав контрольную работу по теме, за которую студент получил наименьшее количество баллов. Выполненные практические задания на зачетной неделе **не принимаются**.

Шкала выставления оценок за зачет:

% от максимальной суммы баллов	оценка
86 - 100 %	5
71-85	4
55-70	3

ТЕХНОЛОГИИ, ИСПОЛЪЗУЕМЫЕ ПРИ КОНТРОЛЕ ЗНАНИЙ СТУДЕНТОВ

1. Проверка выполненной практической работы.
2. Защита практической работы
3. Устный опрос на лекции и практическом занятии
4. контрольная работа
5. Зачет по теоретическим и практическим вопросам

10. Ресурсное обеспечение

Основная учебная литература

1. Молекулярная спектроскопия: основы теории и практика: Учебное пособие / Под ред. проф. Ф.Ф. Литвина. - М.: НИЦ Инфра-М, 2013. (Высшее образование: Бакалавриат). (обложка) ISBN 978-5-16-005727-9. (ЭБС ZNANIUM – www.znanium.com)
2. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии. - Лаборатория знаний Бином, 2013. - ISBN 978-5-94774-765-
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Общие вопросы спектроскопии. - Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2014. - ISBN 978-5-397-04524-7

Дополнительная учебная литература

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений: таблицы спектральных данных. - Бином, Лаборатория знаний, 2012. - ISBN 5-94774-572-0
2. Купцов А.Х., Жижин Г.Н. Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров. - Техносфера, 2013. - ISBN 978-5-94836-360-8. http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=273788
3. Вшивков С.А. Спектральные методы анализа. Учебн. пос., 3- изд., испр. и доп.. - Лань-Трейд, 2012. - ISBN 978-5-8114-1301-0I668

4. **Васильева В.И.** Спектральные методы анализа. Практическое руководство. Учебн.пос., 1-е изд. - Лань-Трейд, 2014. - ISBN 978-5-8114-1638-7
5. **Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д.** Спектрометрическая идентификация органических соединений. - Бином, Лаборатория знаний, 2011. - ISBN 978-5-94774-392-0
6. **Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К.** Определение строения органических соединений: таблицы спектральных данных. - Бином, Лаборатория знаний, 2012. - ISBN 5-94774-572-0
7. **Марченко З.** Методы спектрофотометрии в УФ и видимой областях в неорганическом анализе / Марченко Зигмунт, Бальцежак Мария; Пер.с пол. А.В.Гармаша. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. - 711с.: ил. - (Методы в химии). - Предм.указ.:с.679-698. - ISBN 978-5-94774-369-2.

Периодические издания

- Вестник Московского университета. Серия 2, Химия : научный журнал / учредитель: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова, фак-т химии. - М. : МГУ. - Журнал, основан в ноябре 1946 года. - Выходит отдельной серией с 1960 года - Доступ к архиву статей с 1998 г. на сайте журнала: <http://www.chem.msu.su/rus/vmgu/>
- Геохимия / учредитель: РАН, отделение геологии, геофизики, геохимии и горных наук РАН [и др.]. - М. : МАИК НАУКА. - Журнал, основан в январе 1956 года академиком А.П. Виноградовым. - Содержание выпусков и аннотации статей на английском языке с 1996 г. на сайте издательства: <http://www.maik.rssi.ru/cgi-perl/search.pl?lang=rus>
- Журнал аналитической химии / учредитель: РАН, отделение физикохимии и технологии неорганических материалов и Институт геохимии и аналитической химии. - М. : МАИК Наука. - Журнал, основан в 1946 году. - Содержание выпусков с 1999 г. на сайте журнала: <http://www.zhakh.ru/Lists/Content/view.aspx>
- Журнал неорганической химии / учредитель: РАН, отд-ние физикохимии и технологии неорганических материалов. - М. : МАИК НАУКА. - Журнал, основан в январе 1956 года. - Содержание выпусков и аннотации статей с 1996 г. на английском языке на сайте издательства: <http://www.maik.rssi.ru/cgi-perl/search.pl?lang=rus>
- Заводская Лаборатория. Издательство "Тест-эл" (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Электрофоретические и хроматографические процессы Воронежский государственный университет (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Аналитика и контроль (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Успехи химии. Издательство Журнала "Успехи химии" Известия Академии наук. Серия химическая. Издательство журнала "Известия Академии наук. Серия химическая" (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Научный вестник Новосибирского государственного технического университета Новосибирский государственный технический университет (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Сборник научных трудов Новосибирского государственного технического университета Федеральная информационная система: «Единое окно доступа к информационным ресурсам»: <http://window.edu.ru/>
- Естественные науки. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Астраханский государственный университет" (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Башкирский химический журнал ООО "Научно-исследовательский институт истории науки и техники" (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология Иркутский национальный исследовательский технический университет (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация Воронежский государственный университет (доступ через Elibrary.ru.) — Режим доступа: ограниченный по логину и паролю

- **Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

Электронно-библиотечные системы и базы данных

- Университетская библиотека онлайн – www.biblioclub.ru - Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- ZNANIUM – www.znanium.com -- Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- БД российских журналов East View : <http://dlib.eastview.com> - Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Электронная библиотека диссертаций (ЭБД) РГБ: <http://diss.rsl.ru/> - Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Реферативная и библиографическая БД Web of Science, JCR компании Thomson Reuters: <http://webofknowledge.com> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Реферативная и библиографическая БД SCOPUS: <http://www.scopus.com/home.url> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Elibrary.ru. Научная электронная библиотека (РУНЭБ) Режим доступа: ограниченный по логину и паролю

Научные поисковые системы

- SCIENCE INDEX на основе данных РИНЦ http://elibrary.ru/project_risc.asp Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Scopus <http://www.scopus.com/home.url> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Web of Science <http://webofknowledge.com> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю
- Научная электронная библиотека РФФИ <http://www.elibrary.ru> Режим доступа: ограниченный по логину и паролю

Профессиональные ресурсы сети «Интернет»

<http://window.edu.ru/> - Федеральная информационная система: «Единое окно доступа к информационным ресурсам»

<http://www.rsl.ru> РГБ Российская государственная библиотека

<http://ben.irex.ru> БЕН Библиотека естественных наук

<http://www.gpntb.ru> ГПНТБ Государственная публичная научно-техническая библиотека

<http://ban.pu.ru> БАН Библиотека Академии наук

<http://www.nlr.ru> РНБ Российская национальная библиотека

<http://www.elibrary.ru> Научная электронная библиотека РФФИ

<http://www.lib.msu.ru> Библиотека МГУ

<http://www.kge.msu.ru> Библиотеки химической литературы

<http://www.lib.asu.ru> Электронная библиотека зарубежных изданий

<http://www.chem.asu.ru> Электронная библиотека/неорганическая химия

<http://www.chem.port.ru/>

<http://www.ars.org/portalchemistry/>

<http://www.rusanalytchem.org/> <http://www.rusanalytchem.org/>

<http://www.chem.msu.ru> портал фундаментального химического образования России

<http://lib.uni-dubna.ru/biblweb/> Библиотека университета «Дубна»

- **Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы**

В ходе изучения курса предусмотрено использование компьютера для выполнения измерений на специализированном программном обеспечении, поставленном в комплекте с приборами.

В ходе изучения курса предусмотрено использование презентаций выполненных в программе PowerPoint.

Для выполнения расчетных заданий предусмотрено использование офисного пакета МО.

Для подготовки презентаций – Power Point, Microsoft Office, информационно-библиотечная система MAPK SQL.

Для самостоятельной работы используются классы с доступом к ресурсу Интернет.

- **Описание материально-технической базы**

Лекционная аудитория с компьютером и видеопроектором.

Практические работы проводятся в специально оборудованном химическом практикуме

Приборы:

Весы электронные Ohaus Adventure
 Весы электронные Acculab ALC
 ИК-Фурье спектрометр IRPrestige 21
 ИК-Фурье спектрометр IRAffinity
 Спектрофотометр Unico 2100
 Спе Раман-анализатор Рапорт+

Инжинирингового центра университета

1) Участок тонкопленочных фотовольтаических систем

- Перчаточный бокс для работы в инертной атмосфере СПЕКС ГБ02М
- Вакуумные установки для напыления пленок VRS (РОБВАК, РОССИЯ)
- Дисковая прецизионная резка SYJ 400 CNC
- Ультразвуковая ванна Сапфир 1,3ТТЦ
- Нагревательная плита HP-150 250
- Муфельная печь SNOL 7.2/1300
- Вакуумный сушильный шкаф BINDER VD 23
- Спин-коатинг SPIN-1200 Series
- Вакуумная нагревательная плита LH-403
- Установка для электрохимического осаждения на подложку Esprayer ES-2000S.
- Профилометр NANOVEA P S50
- Спектрофотометр сканирующий спекс ССП-10
- Учебный-лабораторный комплекс для научных исследований солнечных фотоэлектрических преобразователей и малоразмерных модулей ЗАО «Техноэксан».
- Учебно-лабораторный комплекс для исследования спектральных характеристик солнечных элементов ЗАО «Техноэксан».
- Плазма низкого давления DEINER ELECTRONIC, ATTO I
- Гомогенизатор ультразвуковой HO-391
- Вакуумный упаковщик HENKELMAN JUMBO MINI

2) Участок тонкопленочных биосенсорных систем

- Центрифуга 5424 с ротором F-45-24-11
- Вортекс Reax Top Heidolph
- Вакуумный упаковщик HENKELMAN JUMBO MINI
- Мешалка магнитная C-MAG HS7
- Весы аналитические OHAUS EX 224
- Весы лабораторные A&D DX-1200
- Система очистки воды MILLIPORE MILLI-Q Advantage A10 S Kit Z00Q0V0EU
- Сушильный шкаф SNOL 58/350
- Термостат суховоздушный TC-1/20 СПУ
- pH-метр SEVEN COMPACT S220-KIT
- Гомогенизатор ультразвуковой HO-391
- Резак гильотинный CM4000
- Диспенсорная платформа ZX1010 с аэронанесением
- Центрифуга с охлаждением Thermo Fisher Scientific 5804R
- Транслюминатор ECX-F15.C, 254 нм
- Спектрофотометр сканирующий спекс ССП-10

В состав учебно-научной лаборатории кафедры в настоящее время входят:

1. Лаборатория спектральных методов анализа, обладающая следующим современным базовым оборудованием:

- ИК-Фурье спектрометр IRAffinity-1
- ИК-Фурье спектрометр *IRPrestige-21*
- ICPE-9000. Оптический эмиссионный спектрометр параллельного действия с индуктивно-связанной плазмой
- Спектрофотометр ЮНИКО-2100 – 2 шт. (видимая область)
- Спектрофотометр ЮНИКО-2804 (УФ-область)
- Спектрометр Maya 2000Pro
- Спектрофлюориметр «Флюорат»
- Профессиональный лабораторный мутнометр
- Микроволновая система для разложения проб Sineo
- Система очистки воды и фильтрации MILLIPORE

2. Лаборатория электрохимических методов анализа, имеющая следующее оборудование:

- Анализатор вольтамперометрический ТА-4
- pH-метр-иономер Эксперт-001
- Система капиллярного электрофореза «Капель 105»
- Экспресс-метод определения органического углерода (окситермография)
- Потенциостат
- Импедансметр
- Кондуктометры

3. Лаборатория хроматографических методов анализа, оснащенная современным хроматографическим оборудованием:

- Жидкостный хроматограф «Аквилон»
- Газовый хроматограф Shimadzu
- Хроматограф FPLC Pharmacia
- ВЭЖХ система Shimadzu


4. Участок физико-химических испытаний лаборатории композиционных материалов инженерного центра, обеспеченный следующим оборудованием для термических исследований:


- Дифференциальный сканирующий калориметр DSC 240 *F1 Phoenix*®
- Дилатометр с функцией термомеханического анализа TMA 402 *F3 Hyperion*®
- Прибор динамического механического анализа DMA 242.

11. Язык преподавания – русский язык

государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования Московской области
университет «Дубна»
(государственный университет «Дубна»)

Факультет естественных и инженерных наук
Кафедра химии, новых технологий и материалов

УТВЕРЖДАЮ
проректор по учебно-методической
и научной работе
 /С.В. Моржухина/
« 22 » 09 2015 г.



В рабочую программу дисциплины «Молекулярная спектроскопия» по направлению подготовки 04.03.01 Химия, направленность (профиль) программы – Физическая химия, вносятся следующие изменения:

Новая редакция разделов:

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ПК-1- способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам *) **, ***, ****)	<p>Знать: З1(ПК-1) принципы работы, область применения и принципиальные ограничения методов и средств измерений, инструкции по эксплуатации оборудования</p> <p>Уметь У1(ПК-1) Проводить анализ веществ и материалов на соответствие стандартам и техническим условиям, обработка экспериментальных результатов</p> <p>У2(ПК-1) Осуществлять выбор методов и методик анализа структуры и свойств веществ и материалов на соответствие требований к объектам исследования</p> <p>Владеть В1(ПК-1) навыками применения новых методов получения, испытания и оценки новых веществ и материалов</p>
ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры *) **, ***, ****)	<p>Знать: З1(ПК-2) Основное лабораторное оборудование, соответствующее целям и задачам исследования, принципы действия, методы проведения лабораторного контроля, обобщения и обработки информации, оценки результатов измерений</p> <p>Знать З2(ПК-2) существующие методы и методики оценки структуры и свойств веществ и материалов, их применимость и достоверности</p>

	<p>Уметь У1(ПК-2) Осуществлять подбор лабораторно-аналитического оборудования для исследования структуры и свойств веществ и материалов</p> <p>Уметь У2(ПК-2) - Проводить и организовывать работы по настройке оборудования согласно паспорту к прибору и его поверку</p> <p>Уметь У3(ПК-2) - Проводить регистрацию, анализ, обобщение и обработку результатов лабораторных исследований структуры и свойств веществ и материалов</p> <p>Владеть В1(ПК-2) навыками анализа современного состояния методов лабораторного эксперимента и необходимого для его проведения оборудования</p>
ПК-3- владением системой фундаментальных химических понятий *) **, ***, *****)	Владеть В1(ПК-3) Методами поиска, анализа и систематизация профильной периодической литературы, патентов и авторских свидетельств
ПК-4- способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов *), **, ***, *****)	Знать: З1(ПК-4) теоретические и методологические основы смежных с химией математических и естественнонаучных дисциплин и способы их использования при решении конкретных химических и материаловедческих задач
ПК-5- способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий *), **, ***, *****, *****) ;	<p>Знать: З1(ПК-5) основные методы обработки результатов работ в профессиональной сфере деятельности</p> <p>Уметь У2(ПК-5) - Выбирать методы и средства проведения обработки экспериментальных данных</p> <p>Владеть В1(ПК-5) приемами и технологиями систематизации, обработки и подготовки данных для составления отчетов по результатам испытаний по решению профессиональных задач.</p>
ПК-7- владением методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств *), **, ***, *****)	<p>Знать: З1(ПК-7) Методы безопасного обращения с реактивами и лабораторным оборудованием</p> <p>Уметь У1(ПК-7) формулировать цели проведения лабораторного эксперимента, осуществлять планирование эксперимента с учетом норм безопасности</p>

На основании приказа ректора Государственного университета «Дубна» № 1400 от 20.04. 2015 г.. (приложение № 1 к настоящему листу изменений) установлено соответствие компетенций по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» (уровень бакалавриата) и образовательной программы по направлению подготовки 020100.62 «Химия» (уровень бакалавриата)

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ
Московская область

Государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования Московской области
Международный университет природы, общества и человека
«Дубна»

«20» 04 2015 г.

ПРИКАЗ

№ 1400

Об установлении соответствия
компетенций по направлению подготовки
«Химия» (уровень подготовка бакалавров)

В целях установления соответствия между перечнями компетенций федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и федерального государственного образовательного стандарта высшего образования,

ПРИКАЗЫВАЮ:

Установить соответствие компетенций по направлению подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата), и образовательной программой государственного университета «Дубна» по направлению подготовки 020100 Химия (уровень бакалавриата), реализация которой начата до вступления в силу указанной редакции образовательного стандарта согласно приложению.

Ректор



Д.В. Фурсаев

Разослано: в дело, кафедра химии, новых технологий и материалов, проректор по учебно-методической и научной работе.

Проректор по учебно-методической
и научной работе



С.В. Моржухина

Приложение №1
к приказу ректора
от «20» 04 2015 г.

Таблица соответствия компетенций ФГОС ВПО (2010) и ФГОС ВО (2015)
по образовательной программе
Химия, направленность – Физическая химия
направления подготовки
04.03.01. Химия

ФГОС ВО (2015)		ФГОС ВПО (2010)	
код компетенции	формулировка компетенции	код компетенции	формулировка компетенции
ОБЩЕКУЛЬТУРНЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ			
ОК-1	способностью использовать основы философских знаний для формирования мировоззренческой позиции	ОК-2	способностью понимать и анализировать мировоззренческие, социально и лично значимые философские проблемы
		ОК-3	знает основные положения и методы социальных, гуманитарных и экономических наук, способен использовать их при решении социальных и профессиональных задач и способен анализировать социально значимые проблемы и процессы
ОК-2	способностью анализировать основные этапы и закономерности исторического развития общества для формирования гражданской позиции	ОК-1	способностью понимать движущие силы и закономерности исторического процесса; место человека в историческом процессе, политической организации общества
		ОК-3	знает основные положения и методы социальных, гуманитарных и экономических наук, способен использовать их при решении социальных и профессиональных задач и способен анализировать социально значимые проблемы и процессы
ОК-3	способностью использовать основы экономических знаний в различных сферах жизнедеятельности	ОК-3	знает основные положения и методы социальных, гуманитарных и экономических наук, способен использовать их при решении социальных и профессиональных задач и способен анализировать социально значимые проблемы и процессы
ОК-4	способностью использовать основы правовых знаний в различных сферах жизнедеятельности	ОК-4	понимает и соблюдает базовые ценности культуры, обладает гражданственностью и гуманиз-

			мом
ОК-5	способностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач межличностного и межкультурного взаимодействия	ОК-5	умеет логически верно, аргументированно и ясно строить устную и письменную речь
		ОК-11	владеет развитой письменной и устной коммуникацией, включая иноязычную культуру
		ОК-12	владеет одним из иностранных языков (преимущественно английским) на уровне чтения научной литературы и навыков разговорной речи
ОК-6	способностью работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОК-4	понимает и соблюдает базовые ценности культуры, обладает гражданственностью и гуманизмом
		ОК-13	настойчив в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей
		ОК-14	умеет работать в коллективе, готов к сотрудничеству с коллегами, способен к разрешению конфликтов и социальной адаптации
ОК-7	способностью к самоорганизации и самообразованию	ОК-15	способностью в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей
		ПК-10	понимает принципы построения педагогической деятельности в общеобразовательных учреждениях
		ПК-11	владеет методами отбора материала для теоретических занятий и лабораторных работ
		ПК-12	имеет опыт педагогической деятельности и знаком с основами управления процессом обучения в общеобразовательных учреждениях
ОК-8	способностью использовать методы и средства физической культуры для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности	ОК-16	владеет средствами самостоятельного, методически правильного использования методов физического воспитания и самовоспитания для повышения адаптационных резервов организма и укреп-

		ОК-17	ления здоровья готовностью к достижению должного уровня физической подготовленности, необходимого для освоения профессиональных умений и навыков в процессе обучения в вузе и для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности после окончания учебного заведения
ОК-9	способностью использовать приемы первой помощи, методы защиты в условиях чрезвычайных ситуаций	ОК-18	владеет основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф и стихийных бедствий
ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ			
ОПК-1	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	ПК-1	понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности
		ПК-2	владеет основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии)
		ПК-5	представляет основные химические, физические и технические аспекты химического промышленного производства с учетом сырьевых и энергетических затрат
ОПК-2	владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	ПК-4	владеет навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
		ПК-6	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов
		ПК-8	владеет методами регистрации и обработки результатов химически

			экспериментов
ОПК-3	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности	ОК-6	использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
ОПК-4	способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учетом основных требований информационной безопасности	ОК-7	умеет работать с компьютером на уровне пользователя и способен применять навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности
		ОК-8	способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
		ОК-9	владеет основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, имеет навыки работы с компьютером как средством управления информацией
		ОК-10	способностью работать с информацией в глобальных компьютерных сетях
ОПК-5	способностью к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации	ПК-3	способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных
ОПК-6	знанием норм техники безопасности и умением реализовать их в лабораторных и технологических условиях	ОК-18	владеет основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф и стихийных бедствий
		ПК-9	владеет методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств, способно-

			стью проводить оценку возможных рисков
ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ			
Вид профессиональной деятельности: научно-исследовательская			
ПК-1	способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	ПК-4	владеет навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
		ПК-6	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов
ПК-2	владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-7	имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях
		ПК-8	владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов
ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий	ПК-2	владеет основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии)
ПК-4	способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	ОК-6	использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
ПК-5	способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	ОК-7	умеет работать с компьютером на уровне пользователя и способен применять навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности
		ОК-9	владеет основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, имеет навыки работы с компьютером как средством управления информацией
		ОК-10	способностью работать с информацией в глобальных компьютерных сетях

			<p>ПК-3 способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных</p> <p>владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов</p>
ПК-6	владением навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций	<p>ОК-5</p> <p>ПК-8</p>	<p>умеет логически верно, аргументированно и ясно строить устную и письменную речь</p> <p>владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов</p>
ПК-7	владением методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств	<p>ОК-18</p> <p>ПК-9</p>	<p>владеет основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф и стихийных бедствий</p> <p>владеет методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств, способностью проводить оценку возможных рисков</p>
<p align="center">КОМПЕТЕНЦИИ, УСТАНОВЛЕННЫЕ УНИВЕРСИТЕТОМ ДОПОЛНИТЕЛЬНО К ФГОС</p>			

