

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
по дисциплине
Молекулярная спектроскопия

**Кафедра физической и органической химии
химического факультета**

Образовательная программа
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Профиль подготовки
Физическая химия

Уровень высшего образования
специалитет

Форма обучения
очная

Статус дисциплины: входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений

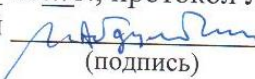
Махачкала, 2021 г.

Рабочая программа по дисциплине «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» составлена в 2021 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (уровень специалитет) от «13» июля 2017 г. № 652.

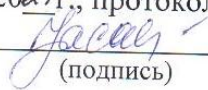
Разработчик: кафедра физической и органической химии, Сулейманов Сагим Икрамович, старший преподаватель.

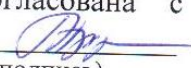
Рабочая программа по дисциплине «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии от «28» 05 2021г., протокол № 9.

Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета от «18» 06 2021г., протокол № 10.

Председатель  доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа по дисциплине «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» согласована с учебно-методическим управлением «09» 07 2021г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений по специальности 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия».

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: общепрофессиональных ОПК – 6.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, лабораторные занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости: текущий контроль успеваемости в форме контрольных работ; промежуточный контроль в форме коллоквиумов; итоговый контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Семестр	Учебные занятия							Форма промежуточной аттестации
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем						СРС, в том числе экзамены	
	Всего	из них						
Лекции		Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	Консультации			
7	72	18	18	–	–	–	36	Зачет

1. Цели освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины – сформировать основы глубоких знаний в области различных спектрометрических методов для самостоятельного планирования и выполнения химико-спектрометрических исследований при решении конкретных химических задач; формирование профессиональных компетенций, необходимых для осуществления профессиональной деятельности по предусмотренным настоящим стандартом видам.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалитета

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» входит в часть ОПОП, формируемую участниками образовательных отношений по специальности 04.05.01 – «Фундаментальная и прикладная химия».

В информационном и логическом планах дисциплина «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» последовательно развивает общие курсы «Физическая химия», «Физические методы исследования», «Строение вещества» и, в свою очередь, служит методологической основой при изучении курсов «ИК-спектроскопия» и «КР-спектроскопия». Курс информационно и логически связан с общими курсами «Математика», «Физика» и «Квантовая химия».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Код и наименование компетенции из ОПОП	Код и наименование индикатора достижения компетенций (в соответствии с ОПОП)	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ОПК-6 Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	ОПК-6.1 Грамотно составляет отчет о проделанной работе в письменной форме	Знает: требования к рабочему журналу химика; правила составления протоколов отчетов химических опытов; требования к представлению результатов исследований в виде курсовых и квалификационных работ. Умеет: представить результаты опытов и расчетных работ согласно требованиям в данной области химии; представить результаты химических исследований в соответствии с требованиями к квалификационным работам. Владеет: опытом представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в виде протоколов испытаний, отчетов, курсовых и квалификационных работ.	Устный опрос, письменный опрос
	ОПК-6.2 Представляет результаты работы в виде научной публикации (тезисы доклада, статья, обзор) на русском и английском языке	Знает: требования к тезисам и научным статьям химического профиля. Умеет: составить тезисы доклада и отдельные разделы статьи на русском и английском языке. Владеет: навыками представления результатов собственных научных изысканий в компьютерных сетях и информационной научно-образовательной среде	Устный опрос, письменный опрос
	ОПК-6.3 Представляет результаты работы в устной форме на русском и английском языке	Знает: грамматику, орфографию и орфоэпию русского и английского языка. Умеет: представить результаты исследований в виде постера; формулировать вопросы к членам профессионального сообщества и отвечать на вопросы по теме проведенного исследования; грамотно и логично изложить результаты	Устный опрос, письменный опрос

		проделанной работы в устной форме на русском и английском языке. Владеет: свободно русским и английским языком.	
--	--	---	--

4. Объем, структура и содержание дисциплины

4.1. Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часов.

4.2. Структура дисциплины

№	Разделы и темы дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	КСР		
Модуль 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Электронная спектроскопия									
1	Природа электромагнитного излучения. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом	7		2	–	–	–	5	Устный опрос, тестирование
2	Теоретические основы спектроскопии	7		2	–	–	–	5	Устный опрос, тестирование
3	Квантовая теория поглощения и излучения. Классификация электронных спектров	7		2		4		5	
4	Характеристичность электронных спектров поглощения. Правила отбора в электронной спектроскопии	7		2		4		5	
Итого по модулю 1		36		8	–	8	–	20	Коллоквиум
Модуль 2. Колебательная спектроскопия									
1	Спектроскопия комбина-	7		4	–	4	–	8	Устный опрос,

	ционного рас- сеяния								тестиро- вание
2	Колебатель- ные и враща- тельные спек- тры. ИК- спектроскопия	7		6	–	6	–	8	Устный опрос, тестиро- вание
Итого по модулю 2		36		10	–	10	–	16	Колло- квиум
Итого		72		18	–	18	–	36	Зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

Модуль 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Электронная спектроскопия

Предмет и метод молекулярной спектроскопии. Сущность взаимодействия излучения с веществом. Природа электромагнитного излучения, различные типы его взаимодействия с веществом. Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий, определяющих спектральную область. Физический смысл параметров спектров поглощения. Спектры поглощения. Электронное состояние молекул. Условия возникновения спектра. Правила отбора. Классификация электронных переходов. Многоэлектронные атомы (ионы). Атомные термы. Теория кристаллического поля. Применение электронных спектров поглощения в изучении кинетики химических реакций, качественном, структурном и количественном анализе.

Тема 1. Природа электромагнитного излучения. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом.

Тема 2. Теоретические основы спектроскопии (постулаты Н. Бора). Стационарные состояния. Уровни энергии и переходы между ними.

Тема 3. Квантовая теория поглощения и излучения. Классификация электронных спектров.

Тема 4. Характеристичность электронных спектров поглощения. Правила отбора в электронной спектроскопии.

Модуль 2. Колебательная спектроскопия

Колебания многоатомных молекул. Условия появления инфракрасных (ИК) спектров и спектров комбинационного рассеяния (КР). Симметрия нормальных колебаний и правила отбора. Классификация колебательных полос. Характеристичность колебаний и структурно-групповой анализ.

Тема 1. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Тема 2. Колебательные и вращательные спектры. ИК-спектроскопия.

4.4. Лабораторные работы

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Электронная спектроскопия		
1	Лабораторная работа №1. Энергетические характеристики излучения	4
2	Лабораторная работа №2. Спектр испускания атома водорода	4
Модуль 2. Колебательная спектроскопия		
1	Лабораторная работа №3. Исследование полимерных материалов методом ИК спектроскопии	4
2	Лабораторная работа №4. Исследование полимерных материалов методом КР спек-	6

троскопии	
-----------	--

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки специалистов широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала;
- подготовка к лабораторным работам;
- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к зачету.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методическое обеспечение
1	Изучение рекомендованной литературы	Устный опрос по разделам дисциплины	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
2	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
3	Решение задач	Проверка домашнего задания	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
4	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа
5	Подготовка к зачету	Устный опрос, либо компьютерное тестирование	См. разделы 7.1, 8, 9 данного документа

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения.

Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка «отлично» ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка «хорошо» ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка «удовлетворительно» ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Типовые контрольные задания

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Виды движения частиц в молекулах и типы молекулярных спектров.
2. Основные положения квантовой механической теории молекул.
3. Равновесные конфигурации молекул и свойства их симметрии. Общие положения о симметрии молекул. Точечные группы высшей симметрии.
4. Вращение молекул и вращательные спектры. Моменты инерции и вращательные постоянные молекул. Вращательные спектры и структура молекул.
5. Действие внешних полей на вращательные уровни и вращательные линии спектров.
6. Колебания двух и многоатомных молекул. Общий метод решения задачи о нормальных колебаниях молекул. Ангармоничность колебаний многоатомных молекул.
7. Общие принципы классификации колебаний по их симметрии и координаты симметрии.
8. Решение задачи о колебаниях молекулы с учетом свойств симметрии.
9. Колебательные спектры многоатомных молекул.
10. Правила отбора в колебательных спектрах.
11. Колебательные спектры простейших двухатомных молекул.
12. Вращательная структура колебательных полос.
13. Электронные состояния и химическая связь в двухатомных молекулах. Классификация электронных состояний двухатомной молекулы как целого.
14. Возможные состояния молекулы с заданной электронной конфигурацией.
15. Электронные оболочки и химическая связь в молекулах, состоящих из двух атомов.

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговый контроль (экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем», изучавшим в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

Примерная тематика рефератов

1. Экспериментальные методы получения и исследования молекулярных спектров.
2. Классификация и свойства молекулярных спектров.
3. ИК-спектроскопия: достижения, проблемы, перспективы.
4. Связь молекулярных спектров с термодинамическими и кинетическими параметрами.
5. Современные ИК-спектрометры.

7.2. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля – 70% и промежуточного контроля – 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий – 5 баллов;
- участие на практических занятиях – 7 баллов;
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ – 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос – 30 баллов;
- письменная контрольная работа – 30 баллов;
- тестирование – 30 баллов.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Гржегоржевский, К.В. Основы молекулярной спектроскопии. Спектры оптического поглощения и люминесценции, применение в изучении полиоксометаллатных нанокластеров: учебное пособие / К.В. Гржегоржевский, А.А. Остроушко. – Екатеринбург: Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2015. – 212 с. – ISBN 978-5-7996-1652-6. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/66564.html> (дата обращения: 25.02.2020).

2. Бёккер, Ю. Спектроскопия: учебник / Ю. Бёккер. – Москва: Техносфера, 2009. – 528 с. – ISBN 978-5-94836-220-5. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная

система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/12735.html> (дата обращения: 25.02.2020).

3. Казаченко Л.П. Молекулярная спектроскопия жидкостей. – Минск: Издательство БГУ, 1978. – 176 с.

4. Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия (Теория, практические работы, задачи). – М.: Издательство МГУ, 1980. – 271 с.

5. Зуев В.Е. Молекулярная спектроскопия высокого и сверхвысокого разрешения. – Новосибирск: Наука, 1976. – 159 с.

б) дополнительная литература:

1. Зайцев, Б.Е. Применение ИК-спектроскопии в химии: учебное пособие / Б.Е. Зайцев, О.В. Ковальчукова, С.Б. Страшнова. – Москва: Российский университет дружбы народов, 2008. – 152 с. – ISBN 978-5-209-03292-2. – Текст: электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS: [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/11418.html> (дата обращения: 25.02.2020).

2. Зинюк Р.Ю., Балыков А.Г., Гавриленко И.Б., Шевяков А.М. ИК-спектроскопия в неорганической технологии. – Ленинград: Химия, 1983. – 158 с.

3. Накамото К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. – М.: Мир, 1991. – 536 с.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. – Москва, 1999. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 21.10.2019). – Яз. рус., англ.

2. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения обо всех видах литературы, поступающих в фонд НБ ДГУ / Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный (дата обращения: 21.10.2019).

3. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html> (дата обращения: 21.10.2019).

10. Методические указания для обучающихся студентов по освоению дисциплины

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;

- наглядные пособия;
- глоссарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций;
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- литературный поиск, используя онлайн поисковую систему NIST/TRC;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Молекулярная спектроскопия конденсированных систем» используются следующие информационные технологии:

- занятия компьютерного тестирования;

- демонстрационный материал применением проектора;
- компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа;
- программы пакета Microsoft Office.

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

В соответствии с требованиями ФГОС ВПО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком). Имеются лаборатории с необходимым оборудованием и реактивами.