

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

Нархуров Т.А.

подпись

« 19 » _____ 2020 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.05 «ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ»**

Направление подготовки- 04.03.01 Химия

Направленность - неорганическая химия, химия координационных
соединений

Форма обучения – очная

Квалификация - бакалавр

Краснодар 2020

Рабочая программа дисциплины «Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО 3++) по направлению подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата)

Программу составил

д.х.н., профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии Буков Н.Н.  14.05.2020 г.

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии 15.05.2020 г., протокол № 10.

Зав. кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии 15.05.2020 г., протокол № 10.

Зав. кафедрой д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий 25.05.2020 г., протокол № 5.

Председатель УМК факультета доцент Беспалов А.В. 

Эксперты:

Р.В. Горохов, главный специалист ООО «Современные технологии», кандидат химических наук, доцент

В.А. Исаев, профессор кафедры физики и информационных систем Кубанского государственного университета, доктор физико-математических наук, доцент

1 Цели и задачи изучения дисциплины

Преподавание курса «Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений» имеет целью дать студенту углубленное понимание принципиальных основ, практических возможностей и ограничений методов электронной спектроскопии при исследовании соединений переходных элементов.

В курсе студентам дается умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные электронной спектроскопии, в том числе публикуемые в научной литературе, позволяющие извлекать уникальную и принципиально важную информацию о строении и свойствах веществ.

1.1 Цель дисциплины

Студент должен *научиться* использованию метода электронной спектроскопии для решения качественных, количественных и структурных задач, знать основы теории и эксперимента основных электронных спектральных методов исследования неорганических и координационных соединений и делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся спектральных данных.

1.2 Задачи дисциплины

В результате изучения данной дисциплины студенты должны

знать: классификацию и характеристику спектральных методов исследования; теоретические основы спектроскопии неорганических и координационных соединений; проблемы получения и регистрации спектров; методы определения энергетических и геометрических параметров неорганических и координационных соединений; принципы работы серийных спектральных приборов; стратегию применения физических методов исследования при идентификации и количественном анализе неорганических и координационных соединений.

уметь: выбирать оптимальные спектральные методы исследования конкретных неорганических и координационных соединений; интерпретировать спектральные данные электронной спектроскопии; готовить исследуемые вещества для спектрального анализа в выбранном диапазоне электромагнитных волн; идентифицировать химические соединения и их строение по данным электронных методов спектрального анализа; применять данные методов электронной спектроскопии при исследовании химических процессов с участием неорганических и координационных соединений.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений» относится к вариативной части Блока 1 учебного плана. Предшествующей дисциплиной является «Физические методы анализа», читаемой в третьем семестре.

Знания, приобретенные при освоении данного курса, будут использованы при решении исследовательских задач химических дисциплин и лабораторных практикумов по неорганической химии и химии координационных соединений.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «Электронная спектроскопия неорганических и координационных со-

единений», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций: ПК-2 и ПК-5

№ п.п	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ПК-2	владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	приборную базу молекулярной спектроскопии	подготовить аппаратуру и образцы неорганических и координационных соединений и записать их молекулярные спектры	методологией молекулярной спектроскопии неорганических и координационных соединений
2	ПК-5	способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	стратегию применения компьютерных технологий в молекулярной спектроскопии при идентификации и качественном анализе неорганических и координационных соединений	применять данные методов молекулярной спектроскопии при исследовании химических процессов неорганических и координационных соединений с помощью современных компьютерных технологий	методологией исследования химических процессов и строения неорганических и координационных соединений

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зач.ед. (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		5			
Контактная работа, в том числе	70,3	70,3			
Аудиторные занятия (всего)					
В том числе:					
Занятия лекционного типа	16	16			
Лабораторные занятия	52	52			
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия)	-	-			
Иная контактная работа	0,3	0,3			
Контроль самостоятельной работы (КСР)	-	-			
Промежуточная аттестация (ИКР)	0,3	0,3			
Самостоятельная работа, в том числе	38	38			
Курсовая работа	-	-			
Проработка учебного материала	38	38			
Выполнение индивидуальных заданий	-	-			
Реферат	-	-			
Контроль	35,7	35,7			
Подготовка к экзамену	35,7	35,7			
Общая трудоемкость	час.	144	108		
	в том числе контактная работа	70,3	52,2		
	зач. ед	4	3		

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 8 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Контактные часы			Самостоятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1.	Введение.	9,8	2	-	-	7,8
2.	Электронные состояния и электронные переходы соединений переходных элементов.	46	6	-	20	20
3.	Электронные спектры поглощения соединений d- и f-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях.	36	6	-	20	10
4.	Другие методы исследования электронных спектральных переходов соединений d- и f-элементов.	22	2	-	12	8
	<i>Всего:</i>		16	-	52	38

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Введение.	Физическая теория метода. Возможности, области применения и интеграция методов электронной спектроскопии.	УО
2	Электронные состояния и электронные переходы соединений d- и f-элементов.	Электронные состояния молекул соединений d- и f-элементов, определение и основные характеристики. Тонкая и сверхтонкая структура электронных спектров молекул. Принцип Франка-Кондона. Классификация и номенклатура электронных состояний и переходов между ними. Электронные состояния и термы свободных ионов d- и f-элементов.	УО, ЛР

3	Электронные спектры поглощения соединений d- и f-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях.	Критерии отнесения полос поглощения к различным электронным переходам. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов в электронной спектроскопии. Диаграммы Оргела и Танабе-Сугано. Квантовомеханическая вероятность электронно-колебательно-вращательных переходов и сила осциллятора. Правила отбора и нарушение запрета. Определение молекулярных постоянных координационных молекул. Модель углового перекрывания.	ЛР, КРС, СРС
4	Другие методы исследования электронных спектральных переходов соединений d- и f-элементов.	Спектры флуоресценции и фосфоресценции соединений d- и f-элементов. Методы рентгеноэлектронной, фотоэлектронной и оже-спектроскопии. Методы изучения поляризуемости молекул: дисперсия оптического вращения и оптический круговой дихроизм.	УО

2.3.2 Занятия семинарского типа

Занятия семинарского типа - не предусмотрены

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1.	Введение	Техника безопасности при работе в химической лаборатории. Работа с электроизмерительными и оптическими приборами.	УО
2.	Электронные состояния и электронные переходы соединений d- и f-элементов.	Работа с Базами данных по электронным спектрам и диаграммам Танабе-Сугано. Самостоятельная работа №1 Наладка и юстировка спектрального оборудования.	ЛР
3.	Электронные спектры поглощения соединений d- и f-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях.	Приготовление образцов для спектральных измерений. Измерение спектров соединений d- и f-элементов в УФ- и видимой области. Самостоятельная работа №2. Итоговая самостоятельная работа	ЛР
4.	Другие методы исследования элек-	Обработка экспериментальных спектральных данных, зачет.	ЛР

	тронных спектральных переходов соединений d- и f-элементов.		
--	---	--	--

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Проведение курсовых работ по дисциплине – не предусмотрено

2.3.5 Примерная тематика рефератов

1. Характеристика методов электронной спектроскопии.
2. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом.
3. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов в спектроскопии.
4. Правила отбора спектральных полос поглощения.
5. Переходы в атомах и молекулах. Правила отбора.
6. Энергетические состояния атомов и молекул. Термы.
7. Полуэмпирические методы в электронной спектроскопии.
8. Спектральные методы расчета констант реакций.
9. Вероятности переходов и правила отбора.
10. Симметрия атомных систем и их уровней энергии.
11. Энергетические уровни двухатомной молекулы.
12. Естественные пределы спектральных измерений.
13. Отнесение электронных переходов.
14. Интенсивность электронных переходов.
15. Влияние полярности растворителя на спектры
16. Спектральные особенности ионов переходных металлов.
17. Критерии, помогающие отнесению полос в электронной спектроскопии.
18. Техника эксперимента в электронной спектроскопии.

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

№	Наименование раздела	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
5.	Введение	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования. Молекулярная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/MOLEKULYRNAYSPEKTROSKOPIY_6.pdf
6.	Электронные состояния и электронные переходы соединений d- и f-элементов.	Буков Н.Н., Павлов П.А., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 1. Электронные спектры. Уч. пособие, КубГУ. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNIESPEKTRI_1CHAST1.pdf

7.	Электронные спектры поглощения соединений d- и f-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях.	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В. Физические методы исследования: Электронная спектроскопия. – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/ELEKTRONNAYSPEKTRI_2.pdf
8.	Другие методы исследования электронных спектральных переходов соединений d- и f-элементов.	Буков Н.Н., Кузнецова С.Л., Костырина Т.В., Буикликий В.Д. Физические методы исследования. Часть 3: Спектроскопия ЯМР (H^1). – Краснодар: КубГУ, 2006. http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/SPEKTROSKOPIYYMR_5.pdf

3. Образовательные технологии

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
4	Л	электронные презентации	12
	ПР	-	
	ЛР	решение проблемных ситуаций в составе малых групп.	6
Итого:			18

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной и письменной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде устного опроса и выполнения самостоятельных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в 8 семестре.

Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала

- обучаемый имеет определенное представление об электронной спектроскопии координационных соединений переходных металлов, но не проявляет их должной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (**не зачтено, неуд.**);
- обучаемый имеет четкие представления об электронной спектроскопии координационных соединений переходных металлов, понимает их сущность, однако обнаруживает затруднение в их воспроизведении и применении на практике, что приводит к необходимости уточняющих и дополнительных вопросов в процессе проверки (**зачтено, удовл.**);
- обучаемый достаточно полно осмыслил материал об электронной спектроскопии координационных соединений переходных металлов, с пониманием формулирует соответствующие понятия (теоретические положения), хотя при их обосновании и воспроизведении нуждается в некоторых уточнениях, обнаруживает умение применять усвоенные знания на практике, допуская мелкие, несущественные недочеты в письменных работах (**зачтено, хор.**);

- высший уровень владения материалом состоит в глубоком осмыслении электронной спектроскопии координационных соединений переходных металлов на понятийном уровне, в умении свободно и логично воспроизводить и обосновывать содержащиеся в них положения примерами и фактами, а также не допускать ошибок при выполнении письменных и практических работ, проявлять самостоятельность и элементы творчества (зачтено, отл).

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

ТЕМЫ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 1

по курсу «Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Электронные состояния и электронные переходы соединений переходных элементов»

- 1) Определить термы основного состояния атомов и ионов d- и f-элементов.
- 2) Определить термы основного и возбужденных состояний для конфигураций d^1-d^9 и f^1-f^{13} .
- 3) Провести аналогию между состояниями с электронной и «дырочной» конфигурациями на примерах конкретных соединений.
- 4) Для конфигураций d^4-d^8 привести термы основного и возбужденных состояний в случае сильного и слабого поля лигандов.
- 5) Проиллюстрировать на конкретных примерах спектральные особенности d- и f-элементов низкоспиновых и высокоспиновых комплексов спектральные особенности d- и f-элементов.

ТЕМЫ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2

по курсу «Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Электронные спектры поглощения соединений d- и f-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях»

- 1) Используя диаграммы Орбиталя и Танабе-Сугано моделировать спектры поглощения соединений d-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях.
- 2) Используя параметры Йоргенсена построить спектроскопический ряд для ионов d-элементов.
- 3) Показать на примерах реальных соединений изменение электронных спектров связанное с изменением геометрии координационного полиэдра.
- 4) Используя метод модели углового перекрытия провести расчет энергетических характеристик соединений меди (II).
- 5) Предложить лабораторный эксперимент по теме курсовой работы.

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Вопросы к экзамену

19.Общая характеристика методов электронной спектроскопии.

20.Классификация электронных спектральных методов исследования.

21. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом.
22. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов в спектроскопии.
23. Правила отбора спектральных полос поглощения.
24. Переходы в атомах и молекулах. Правила отбора.
25. Энергетические состояния атомов и молекул. Термы.
26. Полуэмпирические методы в электронной спектроскопии.
27. Основные спектральные методы расчета констант реакций.
28. Основные характеристики уровней энергии.
29. Вероятности переходов и правила отбора.
30. Симметрия атомных систем и их уровней энергии.
31. Обработка результатов спектральных измерений.
32. Энергетические уровни двухатомной молекулы.
33. Естественные пределы спектральных измерений.
34. Интерпретация электронных спектров.
35. Отнесение электронных переходов.
36. Интенсивность электронных переходов.
37. Влияние полярности растворителя на спектры
38. Спектральные особенности ионов переходных металлов.
39. Критерии, помогающие отнесению полос в электронной спектроскопии.
40. Техника эксперимента в электронной спектроскопии.

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

5.1 Основная литература:

1. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии [Текст] : Учебник для студентов вузов. - М.: Изд-во "МИР" Изд-во "АСТ", 2003. – 683 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 658-661. - ISBN 5030034706. - ISBN 5170187602 : 358.00.
2. Лебухов В.И. Физико-химические методы исследования [Электронный ресурс]: Учебник / В.И. Лебухов, А.И. Окара, Л.П. Павлюченкова; под ред. А.И. Окара. – СПб.: Издательство «Лань», 2012. – 480 с. : ил. – (Учебник для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1320-1. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4543#book_name

5.2 Дополнительная литература:

1. Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: Учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина. С.И. Карпов; под. Ред. В.Ф. Семенова. – СПб.: Издательство «Лань», 2014. – 416 с. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN: 978-5-8114-1638-7. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168#book_name
2. Знаменский, Н.В. Спектры и динамика оптических переходов редкоземельных ионов в кристаллах [Электронный ресурс] / Н.В. Знаменский, Ю.В. Малюкин. – М.: Физматлит, 2008. – 192 с. – ISBN 978-5-9221-0947-5. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/reader/book/59511/#2>

5.3. Периодические издания:

Периодические журналы: «Химия и жизнь»,
«Журнал Общей химии»,
«Журнал Прикладной спектроскопии»,
«Координационная химия»,
«Журнал Структурной химии»,
«Российский химический журнал» и др.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет», необходимых для освоения дисциплины

<http://chemistry.ru/>

<http://www.himhelp.ru/>

<http://www.nglib.ru>.

<http://www.xumuk.ru/>

<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_frame_disp.cgi?sdbno=19659

<http://www.biblioclub.ru/>

<http://kubsu.ru/University/departments/CHEM/inorg/index.php> и др.

Интернет сайты ведущих государственных ВУЗов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, КубГУ, РАН РФ и др.

Зарубежные ведущие научные и учебные центры: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.

Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.

Химический редактор ChemSketch: <http://www.acdlabs.com>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

№	Наименование раздела	Формы самостоятельной работы	Формы отчетности
1	Введение	Актуализация содержания тем изучаемой дисциплины	УО
2	Электронные состояния и электронные переходы соединений d- и f-элементов.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
3	Электронные спектры поглощения соединений d- и f-элементов в видимой и ультрафиолетовой областях.	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
4	Другие методы исследования элек-	Самостоятельное изучение разделов. Работа с учебной литературой, базами	УО

тронных спектральных переходов соединений d- и f-элементов.	данных в сети Internet.	
---	-------------------------	--

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: Microsoft Office (Word, Excel), ACD Labs Chems sketch, Компьютерная программа Hyper Chemistry .

8.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

1. КонсультантПлюс//www.consultant.ru
2. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов.
URL: <http://fcior.edu.ru/>.
3. Российский образовательный портал. URL: <http://www.school.edu.ru/>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для материально-технического обеспечения дисциплины «Электронная спектроскопия неорганических и координационных соединений» используется лабораторное оборудование и учебно-научная аппаратура (интерактивная доска, демонстрационные модели).

При выполнении лабораторных работ для реализации методик используются: Фурье-спектрофотометры, инвентарь изготовления паст и таблеток исследуемых соединений, весы аналитические. При проведении лабораторных работ используются химические реактивы и посуда.

ПЭВМ уровня не ниже Pentium IV с операционной системой Windows XP / Windows 7, Компьютерная программа Hyper Chemistry.

	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
2.	Семинарские занятия	-
3.	Лабораторные занятия	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением и лаборатории факультета, укомплектованные специализированной мебелью и техническими средствами обучения.
4.	Курсовое	-

	проектирование	
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория 422С, оснащенная презентационной техникой и соответствующим программным обеспечением.
7.	Самостоятельная работа	Кабинет для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.