

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

Хагуров Т.А.

подпись

« 26 » _____ 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.02.01 «ИК И КР СПЕКТРОСКОПИЯ

НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ»

Направление подготовки- 04.03.01 Химия

Направленность - Неорганическая химия и химия координационных
соединений

Форма обучения – очная

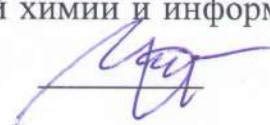
Квалификация - бакалавр

Краснодар 2023

Рабочая программа дисциплины «ИК и КР 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.



Рабочая программа утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии 04.04.2023 г., протокол № 7.

Зав. кафедрой к.х.н., доцент Волынкин В.А.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий 17.04.2023 г., протокол № 7.

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 «ИК и КР спектроскопия неорганических и координационных соединений» имеет целью дать студенту понимание принципиальных основ, практических возможностей и ограничений методов колебательной спектроскопии при исследовании химических соединений.

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

1.1 Цель дисциплины

Дать студентам химикам-неорганикам широкого профиля минимальный набор сведений в области колебательной спектроскопии, необходимый для решения конкретных задач по идентификации и определению строения неорганических и координационных соединений. Научить оптимальному выбору методов колебательной спектроскопии для решения поставленных задач, знать основы теории и эксперимента и делать заключения на основании анализа и сопоставления имеющихся спектральных данных.

1.2 Задачи дисциплины

В результате изучения данной дисциплины студенты должны

1) *знать*:

- основы теории и эксперимента колебательной спектроскопии
- классификацию и характеристику методов колебательной спектроскопии;
- теоретические вопросы колебательной спектроскопии на качественном уровне;
- проблемы получения и регистрации колебательных спектров;
- методы определения энергетических и геометрических параметров химических связей и молекул;
- принципы работы серийных спектральных приборов;
- стратегию применения методов колебательной спектроскопии при идентификации и качественном анализе химических соединений.

2) *уметь*:

- выбирать оптимальные методы колебательной спектроскопии для исследования конкретных химических соединений и веществ;
- интерпретировать спектральные данные колебательной спектроскопии;
- готовить исследуемые вещества для спектрального анализа в выбранном диапазоне электромагнитных волн;
- идентифицировать химические соединения по данным колебательной спектроскопии;
- применять данные методов колебательной спектроскопии при исследовании химических процессов.

1.3 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «ИК и КР 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 структурных задач исследовательских химических дисциплин по неорганической химии и химии координационных соединений.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине «ИК и КР спектроскопия неорганических и координационных соединений», соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций: ПК-2 и ПК-3

№ 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	классификацию и характеристику методов колебательной спектроскопии; теоретические вопросы колебательной спектроскопии на качественном уровне	выбирать оптимальные методы колебательной спектроскопии для исследования конкретных химических соединений и веществ	методологией колебательной спектроскопии
2	ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий	стратегию применения методов колебательной спектроскопии при идентификации и качественном анализе химических соединений	применять данные методов колебательной спектроскопии при исследовании химических процессов	методологией исследования химических процессов и строения химических соединений методами колебательной спектроскопии

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач.ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры			
			7			
Контактная работа, в том числе		108,2	108,2			
Аудиторные занятия (всего)		102	102			
Занятия лекционного типа		34	34			
Лабораторные занятия		68	68			
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-			
Иная контактная работа:		6,2	6,2			
Контроль самостоятельной работы (КСР)		6	6			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2			
Самостоятельная работа, в том числе:		71,8	71,8			
Курсовая работа		-	-			
Проработка учебного материала		71,8	71,8			
Выполнение индивидуальных заданий		-	-			
Реферат		-	-			
Контроль		-	-			
Подготовка к экзамену		-	-			
Общая трудоемкость	час	180	180			
	в том числе контактная работа	108,2	108,2			
	зач. ед.	5	5			

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 7 семестре

№ раз-дела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Самосто-ятельная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1.	Введение.	3,8	2	-	-	1,8
2.	Спектроскопия колебательных переходов в молекулах.	90	16	-	28	46
3.	Применение колебательной спектроскопии в химии.	80	16	-	40	24
	<i>Всего:</i>		34	-	68	71,8

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№ раз-дела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Введение	Физическая теория метода. Возможности, области применения и интеграция методов колебательной спектроскопии.	УО
2	Спектроскопия колебательных переходов в молекулах	Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров Уровни энергии, их классификация. Фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Инфракрасные (ИК) спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния (КР). Правила отбора и интенсивность полос колебательных переходов в ИК-спектрах поглощения и в спектрах КР. Классический подход к решению прямой и обратной колебательных задач. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные и нормальные координаты молекул. Коэффициенты кинематического взаимодействия и силовые постоянные. Учёт симметрии молекул. Типы симметрии нормальных колебаний.	УО, ЛР

		Приводимые и неприводимые представления. Таблицы характеров неприводимых представлений точечных групп симметрии и правила пользования ими при определении типов симметрии и активности нормальных колебаний молекул в спектрах ИК и КР. Характеристичность нормальных колебаний. Концепция групповых частот и её ограничения. Сопоставление ИК- и КР-спектров и выводы о симметрии молекул.	
1	2	3	4
3	Применение колебательной спектроскопии в химии	Идентификация спектральных данных. Качественный и количественный анализ. Приготовление образцов для спектральных измерений. Исследования строения молекул, динамической изомерии, равновесий и кинетики химических реакций. Методы и техника ИК- и КР-спектроскопии. Понятия о методах НПВО и МНПВО. Подготовка образцов для регистрации спектров.	ЛР, СР

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.	Спектроскопия колебательных переходов в молекулах	Измерение ИК спектров пленок полимеров. Измерение ИК спектров твердых соединений. Измерение ИК-спектров поглощения жидких соединений.	ЛР
3.	Применение колебательной спектроскопии в химии	Работа с Базами данных по ИК спектрам. Самостоятельная работа №1. Самостоятельная работа №2. Итоговая самостоятельная работа	ЛР

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Проведение курсовых работ по дисциплине – не предусмотрено

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
4	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
5	Спектроскопия колебательных переходов в молекулах	1.Буков Н.Н., Колоколов Ф.А., Костырина Т.В., Кузнецова С.Л. Физические методы исследования: Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNAYSPEKTROSKOPIY_4.pdf
6	Применение колебательной спектроскопии в химии	Буков Н.Н., Костырина Т.В., Абрамов Д.Е., Фурсина А.Б. Физические методы исследования. Часть 2. Колебательная спектроскопия. Уч. пособие, КубГУ, http://www.kubsu.ru/sites/default/files/department/KOLEBATELNIESPEKTRI_3.pdf

3. Образовательные технологии

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

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде устного опроса и выполнения самостоятельных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в 4 семестре.

Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала

- обучаемый имеет определенное представление об ИК спектральных методах исследования, но не проявляет их должной осмысленности и не справляется с выполнением соответствующих письменных и экспериментальных работ (**незачтено**);

- обучаемый имеет четкие представления об ИК спектральных методах исследования, 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 ИК спектральных методах исследования, 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 ИК спектральных методов исследования 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 «ИК и КР спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Измерение ИК спектров твердых соединений»

Записать в таблетках с KBr и в суспензии с вазелиновым маслом, провести обработку и отнесение полос поглощения ИК спектров твердых солей следующих соединений:

- А) безводных и кристаллогидратов сульфатов натрия и меди;
- Б) моно-, ди- и тризамещенных фосфатов натрия;
- В) кислых, основных и нормальных карбонатов калия и кальция;
- Г) алюмокалиевых и хромокалиевых квасцов;
- Д) нитратов калия, натрия и лития;

ТЕМЫ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ № 2

по курсу «ИК и КР спектроскопия неорганических и координационных соединений»

по теме «Измерение ИК-спектров поглощения газов и жидких соединений»

Записать, провести обработку и отнесение полос поглощения ИК спектров газов и растворов следующих соединений:

- А) пары воды, аммиака, сероводорода, бензола, хлороформа;
- Б) первичных и вторичных аминов;
- В) кислых, основных и нормальных карбонатов калия и кальция;
- Г) алюмокалиевых и хромокалиевых квасцов;
- Д) нитратов калия, натрия и лития;

ТЕМА ИТОГОВОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ
по курсу «ИК и КР спектроскопия неорганических и координационных соединений»

Записать спектры, провести отнесение полос поглощения и установить химическую формулу и строение неизвестного соединения.

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Вопросы к зачету

1. Общая характеристика методов колебательной спектроскопии.
2. Полуэмпирические методы в колебательной спектроскопии.
3. Прямая и обратная спектральная колебательная задача.
4. Законы светопоглощения.
5. Вероятности колебательных переходов и правила отбора.
6. Интенсивности в колебательных спектрах.
7. Химические процессы, влияющие на ширину спектральной линии.
8. Обработка результатов спектральных измерений.
9. Естественные пределы спектральных измерений.
10. Концепция групповых частот в колебательной спектроскопии
11. Корреляция силовых постоянных связей.
12. Правила отбора в колебательной спектроскопии
13. Симметрия молекулярных колебаний
14. Методика эксперимента в колебательной спектроскопии.
15. Влияние растворителя на колебательные спектры
16. Различия в ИК- и КР-спектроскопии.
17. Нормальные колебания многоатомных молекул.
18. Анализ нормальных колебаний молекул.
19. Двухатомные молекулы.
20. Трехатомные молекулы.
21. Четырехатомные молекулы.
22. Пятиатомные молекулы.
23. Шестиатомные молекулы.
24. Многоатомные молекулы.
25. Координационные соединения с азотсодержащими лигандами.
26. Координационные соединения с кислородсодержащими лигандами.
27. Координационные соединения с серосодержащими лигандами.
28. Координационные соединения с полидентатными лигандами.
29. Металлорганические соединения.
30. Бионеорганические соединения.

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. Буков, Н.Н. Физические методы исследования: колебательная спектроскопия [Текст] : учебное пособие / Н. Н. Буков, Ф. А. Колоколов, Т. В. Костырина, С. Л. Кузнецова ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар : [Кубанский государственный университет], 2010. - 53 с. : ил. - Библиогр. : с. 46. - 8 р. 45 к.
3. 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. Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Г.М. Курамшина. - М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. : с. 392-393. - ISBN 9785947747652. - ISBN 9785030038469 : 379.50.

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.

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

№	Наименование раздела	Формы самостоятельной работы	Формы отчетности
1	Введение	Актуализация содержания тем изучаемой дисциплины	УО
2	Спектроскопия колебательных переходов в молекулах	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР
3	Применение колебательной спектроскопии в химии	Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к лабораторным занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.	УО, ЛР

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 «ИК и КР спектроскопия неорганических и координационных соединений» используется лабораторное оборудование и учебно-научная аппаратура (интерактивная доска, демонстрационные модели).

При выполнении лабораторных работ для реализации методик используются: инфракрасные 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.