Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра биофизики и физики конденсированного состояния

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.В.Э.3.2 Спектроскопические методы анализа»

Уровень высшего образования

МАГИСТРАТУРА

Направление подготовки
03.04.02 Физика
(код и наименование направления подготовки)

Биохимическая и медицинская физика
(наименование направленности (профиля) образовательной программы)

Квалификация
Магистр

Форма обучения
Очная

Год набора 2025

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.В.Э.3.2 Спектроскопические методы анализа*» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра биофизики и физики конденсированного состояния
наименование кафедры

протокол № 7 от "21" февраля 2025г.

Заведующий кафедрой
Кафедра биофизики и физики конденсированного состояния _____ В.Л. Бердинский
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

Исполнители:
доцент кафедры БФФКС _____ Д.А. Раздобреев
должность *подпись* *расшифровка подписи*

_____
должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по направлению подготовки
03.04.02 Физика _____ М.Г. Кучеренко
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Научный руководитель магистерской программы _____ С.Н. Летута
личная подпись *расшифровка подписи*

Заведующий отделом формирования фонда и научной обработки документов
_____ С.А. Биктимирова
личная подпись *расшифровка подписи*

Уполномоченный по качеству факультета
_____ А.Д. Стрекаловская
личная подпись *расшифровка подписи*

№ регистрации _____

Раздобреев Д.А., 2025
© ОГУ, 2025

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины - обеспечить полное усвоение теоретических и практических основ спектроскопических методов анализа.

Задачи: изучить основные спектроскопические методы установления структуры органических соединений, включая масс-спектрометрию, электронную и колебательную спектроскопию, спектроскопию ядерного магнитного резонанса; сформировать навыки расшифровки масс-спектров, ИК- и УФ-спектров, спектров ЯМР.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к дисциплинам (модулям) по выбору вариативной части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.6 Анатомия и физиология человека*

Постреквизиты дисциплины: *Отсутствуют*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ПК*-2 ПК-2 Способен проводить под научным руководством эксперименты с применением современного оборудования и проводить анализ научных данных	ПК*-2-В-1 Осознает ограничения используемой методологии, описывает, анализирует и критически оценивает экспериментальные данные, делает обоснованные выводы	**Знать:** действующие патентно-информационные базы данных **Уметь:** анализировать и обобщать результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии) **Владеть:** навыками осуществления поиска специализированной информации в патентно-информационных базах данных

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 академических часа).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	2 семестр	всего
Общая трудоёмкость	**144**	**144**
Контактная работа:	**48,25**	**48,25**
Лекции (Л)	16	16
Практические занятия (ПЗ)	32	32
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: *- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий;*	**95,75**	**95,75**

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	2 семестр	всего
- изучение разделов курса в системе электронного обучения; *- подготовка к практическим занятиям;* *- подготовка к рубежному контролю и т.п.)*		
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	**зачет**	

Разделы дисциплины, изучаемые в 2 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Общая характеристика спектроскопических методов анализа	23	2	5		16
2	Электронная УФ спектроскопия	23	2	5		16
3	Колебательная ИК спектроскопия	24	3	5		16
4	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	25	3	6		16
5	Масс-спектрометрические методы исследования строения органических соединений	25	3	6		16
6	Комбинированные структурные методы органического анализа	24	3	5		16
	Итого:	144	16	32		96
	Всего:	144	16	32		96

4.2 Содержание разделов дисциплины

1 Общая характеристика спектроскопических методов анализа

Возникновение и развитие физических методов исследования строения органических соединений. Краткая характеристика спектроскопических методов. Комплексное использование спектроскопических методов в целях идентификации веществ и установления их химического строения. Области применения спектрального анализа, значение в современном мире.

2 Электронная УФ спектроскопия

Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

3 Колебательная ИК спектроскопия

Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характери-

стичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 $см^{-1}$).

4 Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A_2, AX, AB и A_2B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия $J_{H–H}$. Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия $J_{C–H}$, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР

5 Масс-спектрометрические методы исследования строения органических соединений

Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом: простой разрыв связей (α-разрыв, бензильный и аллильный разрывы), ретро-реакция Дильса-Альдера, перегруппировка Мак-Лафферти, скелетные перегруппировки, ониевые реакции. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

6 Комбинированные структурные методы органического анализа

Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов. Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа, имеющих различную степень сложности.

4.3 Практические занятия (семинары)

№ занятия	№ раздела	Тема	Кол-во часов
1	2	Запись и интерпретация УФ спектров	4

№ занятия	№ раздела	Тема	Кол-во часов
2	3	Запись и интерпретация ИК спектров	4
3	4	Интерпретация спектров ЯМР ^{1}H	4
4		Интерпретация спектров ЯМР ^{13}C	4
5		Интерпретация спектров 2D ЯМР (^{1}H-^{1}H COSY, ^{13}C-^{1}H COSY, ^{1}H-^{13}C COSY)	4
6		Интерпретация спектров ЯМР ^{15}N, ЯМР ^{19}F, ЯМР ^{31}P	4
7	5	Интерпретация масс-спектров	4
8	6	Решение задач с привлечением комплекса структурных методов анализа	4
		Итого:	32

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Каныгина О. Н. Физические методы исследования веществ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / О. Н. Кангина, А. Г. Четверикова, В. Л. Бердинский. - Оренбург. гос. ун-т. - Оренбург : ОГУ, 2014. - 141 с. – Загл. с тит. экрана. – Adobe Acrobat Reader 6.0.- Режим доступа: littp://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/6596_2014/204.pdf

2. 1. Гржегоржевский, К. В. Основы молекулярной спектроскопии: спектры оптического поглощения и люминесценции, применение в изучении полиоксометаллатных нанокластеров : учебное пособие : [16+] / К. В. Гржегоржевский, А. А. Остроушко ; Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина. – Екатеринбург : Издательство Уральского университета, 2015. – 214 с. : схем., табл., ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=696667 (дата обращения: 10.04.2023). – Библиогр.: 208. – ISBN 978-5-7996-1652-6. – Текст : электронный.

5.2 Дополнительная литература

1. Кириллова Е.А. Методы спектрального анализа : учеб. пособие [Текст] / Е.А. Кириллова, В.С Маряхина. - Оренбург. гос. ун-т. – Оренбург : ООО ИПК «Университет», 2013. – 106 с. - ISBN 978-5-4417-0324-6.

2. Преч Э. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных = Structure determination of organic compounds [Текст] / Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер; пер. с англ. Б. Н. Тарасевича. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 440 с.

3. Органическая химия : практикум: учеб. пособие [Текст] / Е. А. Строганова [и др.] - Оренбург. гос. ун-т. - Оренбург : Университет, 2013. Ч. 3 : Применение методов УФ, ИК и ПМР спектроскопии в структурном анализе органических соединений. - 2013. - 116 с. - ISBN 978-5-4418-0035-8.

4. Иоффе Б.В. Физические методы определения строения органических соединений: учеб. пособие для химических вузов / Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин – М.: Высш. шк., 1984. - 336 с.

5.3 Периодические издания

1. Журнал экспериментальной и теоретической физики : журнал. - М. : Академиздатцентр "Наука" РАН, 2016.

2. Успехи физических наук : журнал. - М. : Агентство "Роспечать", 2016.
3. Оптика и спектроскопия : журнал. - М. : Академиздатцентр "Наука" РАН, 2017, 2018.

5.4 Интернет-ресурсы

1. www.ph4s.ru - Физика студентам и школьникам. Образовательный проект А.Н. Варгина, МИФИ.
2. http://kvant.mccme.ru/ - Научно-популярный физико-математический журнал «Квант».
3. http://www.physbook.ru/ - Электронные учебники и журналы по физике.
4. https://openedu.ru/course/ - «Открытое образование», Каталог курсов, МООК: «Квантовая физика».
5. http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index - Журнал экспериментальной и теоретической физики.
6. https://ufn.ru/ - Успехи физических наук : журнал.

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Перечень лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система РЕД ОС
2. Пакет офисных приложений LibreOffice
3. Программная система для организации видео-конференц-связи MTS Link
4. Яндекс.Браузер - браузер, созданный компанией «Яндекс» на основе движка (бесплатная версия) Режим доступа: https://browser.yandex.ru.

Информационные справочные системы

1. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. / Разработчик ООО НПП «ГАРАНТ-Сервис», 119992, Москва, Воробьевы горы, МГУ, [1990–2024]. – Режим доступа в сети ОГУ http://garant.net.osu.ru
2. КонсультантПлюс [Электронный ресурс]: электронное периодическое издание справочная правовая система. / Разработчик ЗАО «Консультант Плюс», [1992–2024].
3. http://edu.garant.ru/garant/study/ - Интернет-версия ГАРАНТ-Образование, Система ГАРАНТ для студентов, аспирантов и преподавателей

Специализированное ПО, используемое при реализации образовательных программ ФизФ

1. "Облако знаний.Школа", облачный сервис https://school.imumk.ru Договор от 21.12.2021 № СКАН_132/223-4.2.1.2/49 ООО "ФИЗИКОН ЛАБ" 5 лет (по 20.12.2026г)
2. "Виртуальный практикум по физике для вузов" облачный сервис https://school.imumk.ru Договор №281/57 от 15.12.2021 ООО "ФИЗИКОН ЛАБ"5 лет (по 15.12.2026г)

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, семинарского типа, для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.