



Факультет	Естественных наук	
Кафедра	Химии	
Направление подготовки	04.04.01 Химия	
Направленность (профиль)	Экспертиза биологически активных соединений	
Молекулярная спектроскопия биологически активных веществ		Б1.В.ДВ.01.02

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого»  
ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л.Н. Толстого»

УТВЕРЖДЕНА  
на заседании  
Ученого совета университета  
протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Молекулярная спектроскопия биологически активных веществ»**

**Трудоемкость: 3 зачетные единицы**

**Квалификация выпускника: Магистр**

**Форма обучения: очно-заочная**

**Год начала обучения: 2016**

Заведующий кафедрой химии  Ю.М. Атрощенко

Декан ФЕН

 И.В. Шахельдян

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры .....	4
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных .....	4
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	5
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине .....	5
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	11
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	14
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем .....	15
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	16
12. Аннотация рабочей программы дисциплины. ....	17
13. Лист регистрации изменений к рабочей программе дисциплины .....	18
Разработчик: .....	19

# 1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотнесенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

Планируемые результаты освоения образовательной программы (код и название компетенции)	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования компетенции в процессе освоения образовательной программы
ПК-3 готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	<p><b>знает:</b> теоретические основы методов молекулярной спектроскопии</p> <p><b>умеет:</b> применять методы молекулярной спектроскопии для проведения экспериментальных и теоретических научных исследований</p> <p><b>владеет и (или) имеет опыт деятельности:</b> навыками расшифровки и интерпретации данных молекулярной спектроскопии</p>	В соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП
ДПК-1 знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования	<p><b>Выпускник знает:</b> структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений и методы их исследования</p> <p><b>умеет:</b> выбирать и применять различные методы молекулярной спектроскопии для установления структуры, строения и свойств биологически активных и токсических соединений</p> <p><b>владеет и (или) имеет опыт деятельности:</b> навыками расшифровки и интерпретации данных молекулярной спектроскопии биологически активных и токсических соединений</p>	В соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП
ДПК-2 владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений	<p><b>Выпускник знает:</b> теоретические основы методов статистической обработки результатов спектрального анализа</p> <p><b>умеет:</b> использовать методы молекулярной спектроскопии и хемометрики для решения конкретных профессиональных задач</p> <p><b>владеет и (или) имеет опыт деятельности:</b> методикой спектрального анализа биологически активных и токсических соединений, статистической обработки спектральных данных</p>	В соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП МАГИСТРАТУРЫ

Дисциплина «Молекулярная спектроскопии биологически активных веществ» является дисциплиной по выбору вариативной части Блока 1 учебного плана. Изучение данной дисциплины базируется на знаниях студентами органической, неорганической, физической, аналитической, биологической и токсикологической химии.

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем зачетных единиц / часов по формам обучения
<b>Максимальная учебная нагрузка (всего)</b>	3/108
<b>Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего)</b>	<b>16</b>
в том числе:	
лекции с применением мультимедийных технологий и раздаточным материалом для студентов	4
лабораторные занятия	12
контроль самостоятельной работы	
<b>Самостоятельная работа студента (всего)</b>	<b>92</b>
в том числе:	
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к лабораторным занятиям	44
выполнение заданий для самостоятельной работы в модульной объектно-ориентированной динамической учебной среде Moodle	42
подготовка к зачету	6
<b>зачет</b>	
<i>Промежуточная аттестация в форме: зачета</i>	

## 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ

Наименование тем (разделов).	Количество академических или астрономических часов по видам учебных занятий			
	Занятия лекционного типа	Лабораторные занятия	Другие виды учебных занятий	Самостоятельная работа обучающихся
Тема 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Электронная спектроскопия биологически активных веществ	2	4		36
Тема 2. Колебательная спектроскопия биологически активных веществ	1	4		25
Тема 3. Масс-спектрометрия биологически активных веществ	1	4		25
Подготовка к зачету				6
<b>ИТОГО</b>	<b>4</b>	<b>12</b>		<b>92</b>

**Тема 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Электронная спектроскопия биологически активных веществ**

Области электромагнитного спектра. Возникновение молекулярных спектров. Спектры поглощения. Классификация методов молекулярной спектроскопии. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры молекул БАВ: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа органических БАВ по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

### **Тема 2. Колебательная спектроскопия биологически активных веществ**

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, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп БАВ. Представления о технике эксперимента и методах приготовления проб в ИК-спектроскопии.

### **Тема 3. Масс-спектрометрия биологически активных веществ**

Принципы масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Отношение массы к заряду. Масс-спектр. Молекулярные предшественники. Стабильные и метастабильные ионы. Фрагментация. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация. Ионный ток и сечение ионизации. Разрешающая сила масс-спектрометра. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Спектрометр ион-циклотронного резонанса. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Метод хроматомасс-спектрометрии. Принцип работы и устройство хроматомасс-спектрометра. Способы ионизации. Квадрупольный масс-ионизатор. Возможности метода.

## **5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Самостоятельная работа по дисциплине имеет своей целью получение необходимых знаний и умений для подготовки к выполнению лабораторных работ при условии самостоятельной работы с литературой (основной и дополнительной) используя ресурсы НОБИ-центра университета, ЭБС, системы управления обучением MOODLE.

Тематика лабораторных работ, порядок выполнения и контроля самостоятельной работы студентов соответствует приведенному в разделе 4 данного документа.

## **6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

### **6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы**

Формирование компетенций «готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований» (ПК-3), «знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования» (ДПК-1), «владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений» (ДПК-2) осуществляется в несколько этапов в соответствии с учебным планом и

планируемыми результатами освоения ОПОП, соотношенными с планируемыми результатами обучения по каждой дисциплине (модулю) и практике.

### 6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3)		
Знания	теоретических основ методов молекулярной спектроскопии	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий
Умения	применять методы молекулярной спектроскопии для проведения экспериментальных и теоретических научных исследований	
Навыки	расшифровки и интерпретации данных молекулярной спектроскопии	
Знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования (ДПК-1)		
Знания	структуры, строения и свойств биологически активных и токсических соединений и методов их исследования	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий
Умения	выбирать и применять различные методы молекулярной спектроскопии для установления структуры, строения и свойств биологически активных и токсических соединений	
Навыки	обработки данных молекулярной спектроскопии биологически активных и токсических соединений	
Владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений (ДПК-2).		
Знания	теоретических основ методов статистической обработки результатов спектрального анализа	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы,
Умения	использовать методы молекулярной спектроскопии и хемометрики для решения конкретных профессиональных задач	
Навыки	владения методикой спектрального анализа биологически активных и токсических соединений,	

статистической спектральных данных	обработки	тестирования, самостоятельных заданий	проверки творческих
---------------------------------------	-----------	---	------------------------

Критерии оценивания компетенций формируются на основе балльно-рейтинговой системы с помощью всего комплекса методических материалов, определяющих процедуры оценивания знаний, умений, навыков, характеризующих данный этап формирования компетенций (пункты 6.3, 6.4).

### **6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

#### **Типовые вопросы для самостоятельной проработки:**

1. Применение УФ спектроскопии для идентификации сильнодействующих и наркотических веществ и их прекурсоров.
2. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
3. Возможности ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье.
4. Применение ИК и КР спектроскопии для идентификации сильнодействующих и наркотических веществ и их прекурсоров.
5. Применение молекулярной спектроскопии в биологии и медицине.
6. Обзор технических характеристик ИК и УФ спектрофотометров ведущих производителей современного аналитического оборудования.

#### **Типовые контрольные задания:**

1. Почему пропан имеет длину поглощения 140, а циклопропан 190 нм?
2. Чем вызван сдвиг и небольшое увеличение интенсивности полос поглощения у следующих соединений:
  - а) метан 125 нм, хлорметан 173, нм,
  - б) метан 125 нм, метиловый спирт 183 нм,
  - в) метан 125 нм, метиламин 213 нм,
  - г) этан 135 нм, триэтиламин 227 нм,
  - д) метан 135 нм, диметилсульфид 229 нм,
  - е) метан 125 нм, бромметан 204 нм,
  - ж) метан 125 нм, иодистый метил 258 нм.
 Нарисуйте спектры этих соединений на одном рисунке и укажите причины смещения полос поглощения.
3. Охарактеризуйте УФ спектр непредельного соединения. От чего зависит диапазон полос поглощения этих соединений?
4. Укажите причины появления УФ спектра алкенов, диенов, полиенов.
5. Как изменяются параметры УФ спектра для соединений типа  $\text{CH}_3(\text{CH}=\text{CH})_n\text{CH}_3$ ?
6. К каким изменениям в УФ спектре приводит накопление  $\text{C}=\text{C}$  связей, появление электронодонорных заместителей, замена двойной связи на тройную, появление галогена в цепи? В чем причина таких изменений?
7. Используя справочные данные, зарисуйте спектры следующих соединений: этилена, дихлорэтилена, метилэтилена, диметилэтилена, бутадиена-1,3. Обоснуйте наблюдаемый батохромный сдвиг.
8. Используя справочные данные, зарисуйте спектры следующих соединений: этилена, трихлорэтилена, бутилэтилена, декатетраена-2,4,6,8.
9. Используя справочные данные, зарисуйте спектры следующих соединений: ацетилен, алкилацетилен, диалкилацетилен, бутадиена.
10. Как изменится положение полос поглощения в УФ-спектре п-нитрофенола при замене изооктана на этанол?

11. Идентифицируйте соединение по масс-спектру электронного удара (масс-спектр прилагается)
12. На рисунке представлен масс-спектр электронного удара органического соединения. Установите, какому из перечисленных соединений принадлежит этот спектр: 1) бензойная кислота; 2) о-этилфенол; 3) о-метокситолуол; 4) п-этилфенол; 5) фенилэтиловый эфир; 6) п-толилметилвый эфир; 7) 2-фенилэтиловый спирт; 8) 1-фенилэтиловый спирт; 9) 2,4-диметилфенол; 10) 2,6-диметилфенол (масс-спектр прилагается)
13. Определите структуру вещества  $C_2H_4O_2$  по данным масс-спектра ( $m/z$ ): 60 (82), 45 (100), 43 (95), 42 (12), 29 (95), 27 (10), 15 (20).
14. По ИК-спектру определите структуру соединения  $C_9H_{10}O_3$ , т.пл.  $50^\circ C$ . Соединение образует кристаллическое производное с 2,4-динитрофенилгидразином (ИК-спектр прилагается).
15. Предложите структурные формулы веществ состава  $C_8H_7OCl$  и их ИК-характеристики.
16. Укажите различия в ИК-спектрах ацетона, ацетоуксусного эфира и ацетофенона.
17. В ИК-спектре цис 1,2-циклопентандиола полоса поглощения ОН-группы имеет более низкую частоту, чем полоса поглощения свободной ОН- группы; и эта полоса не исчезает даже при сильном разбавлении. Приведите возможные объяснения.
18. В ИК-спектре ацетилацетона наблюдаются следующие полосы поглощения: 1730; 1680; 1640  $cm^{-1}$ . Сделайте отнесение этих полос, учитывая таутомерию соединения.
19. Какие изменения можно наблюдать в ИК-спектре этанола при проведении реакции этерификации взаимодействием этанола с уксусной кислотой.
20. Укажите особенности ИК-спектров следующих соединений: ацетон, уксусная кислота, этилацетат (ИК-спектры прилагаются).
21. Как с помощью ИК-спектроскопии можно различить соединения в следующих парах: а)  $CH_3COOH$ ;  $CH_3COCl$  б)  $CH_3COOH$ ;  $CH_3COOCH_3$  в)  $CH_3COOH$ ;  $CH_3CHO$ ?
22. Как с помощью ИК-спектроскопии можно контролировать ход реакции diazotирования анилина
23. Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК- спектра,  $cm^{-1}$  : 3320, 2940, 1600, 1460, 1380, 1210: бензиловый спирт, пропиловый спирт или уксусная кислота?

#### Примеры тестовых заданий:

- Как расшифровывается аббревиатура УФ-спектроскопия?
  - 1) спектроскопия ядерного магнитного резонанса;
  - 2) инфракрасная спектроскопия;
  - 3) масс-спектрометрия;
  - 4) ультрафиолетовая спектроскопия.
- Укажите длины волн, соответствующие спектральной области УФ-спектроскопии
  - 1) 760 – 1100 нм;
  - 2) 180 – 760 нм;
  - 3) 1 – 100 м;
  - 4) 10 – 150 мм.
- Применение спектрофотометрии в УФ и видимой областях спектра основано на \_\_\_\_\_ электромагнитного излучения соединениями, содержащими хромофорные и ауксохромные группировки.
- Границы ультрафиолетовой области спектра составляют:
  - 1) 10-400 нм;
  - 2) 400-750 нм;
  - 3) 750-2500 нм;
  - 4) 2500-5000.
- Область электромагнитных волн, соответствующая дальней зоне УФ-области, лежит в диапазоне:



- 1) 1-10 нм;
  - 2) 10-400 нм;
  - 3) 10-200 нм;
  - 4) 200-400 нм.
6. Область электромагнитных волн, соответствующая ближней зоне УФ-области, лежит в диапазоне:
- 1) 1-10 нм;
  - 2) 10-400 нм;
  - 3) 10-200 нм;
  - 4) 200-400 нм.
7. Как расшифровывается аббревиатура ИК-спектроскопия?
- 1) спектроскопия комбинированного рассеяния;
  - 2) инфракрасная спектроскопия;
  - 3) ультрафиолетовая спектроскопия;
  - 4) электромагнитная спектроскопия.
8. Инфракрасные спектры возникают в результате \_\_\_\_\_ движения молекул при поглощении энергии:
- 1) поступательного;
  - 2) вращательного;
  - 3) колебательного;
  - 4) относительного.
9. В каком диапазоне инфракрасной области спектра находятся частоты нормальных колебаний молекул?
- 1) 1 – 100 см<sup>-1</sup>;
  - 2) 2000 – 500 см<sup>-1</sup>;
  - 3) 4000 – 400 см<sup>-1</sup>;
  - 4) 1000 – 10 см<sup>-1</sup>.
10. На какие типы подразделяются нормальные колебания?
- 1) валентные;
  - 2) параллельные;
  - 3) деформационные;
  - 4) угловые.
11. Укажите формы валентных колебаний:
- 1) веерная;
  - 2) ножничная;
  - 3) симметричная;
  - 4) ассиметричная.
12. Частота, соответствующая колебанию определенной связи, мало изменяющейся при переходе от одной молекулы к другой, называется \_\_\_\_\_.
13. Под «областью отпечатков пальцев» в ИК-спектроскопии подразумевают диапазон спектра
- 1) 1500 – 600 см<sup>-1</sup>;
  - 2) 3200 – 1400 см<sup>-1</sup>;
  - 3) 4000 – 400 см<sup>-1</sup>;
  - 4) 200 – 100 см<sup>-1</sup>.
14. Укажите длины волн, соответствующие спектральной области ИК-спектроскопии
- 1) 760 – 1100 нм;
  - 2) 180 – 760 нм;
  - 3) 1 – 100 м;
  - 4) 10 – 150 мм.
15. Области применения ИК-спектроскопии:
- 1) анализ состава и структуры органических молекул;
  - 2) регистрация различных функциональных групп в молекулах;

- 3) изучение электронной структуры атомов и молекул;  
4) количественный анализ в неорганической и аналитической химии.
16. Приборы для получения ИК-спектров называются \_\_\_\_\_.
17. Какое вещество используется для приготовления таблеток для записи ИК-спектров?
- 1) хлорид натрия;
  - 2) бромид калия;
  - 3) сульфат магния;
  - 4) гидроксид бария
18. Укажите типичную область колебаний О-Н-группы,  $\text{см}^{-1}$ :
- 1) 1300-900 ;
  - 2) 3000-2800;
  - 3) 3650-3200;
  - 4) 2200-2000.
19. Укажите типичную область колебаний N-H-группы,  $\text{см}^{-1}$ :
- 1) 3500-3300;
  - 2) 400-100;
  - 3) 3000-26000;
  - 4) 1200-800.
20. Укажите типичную область колебаний С-О-группы,  $\text{см}^{-1}$ :
- 1) 1500-1100;
  - 2) 3000-2800;
  - 3) 3650-3200;
  - 4) 1300-1050.
21. Укажите типичную область колебаний С=О-группы,  $\text{см}^{-1}$ :
- 1) 1300-900;
  - 2) 1760-1690;
  - 3) 650-400;
  - 4) 2200-2000.

#### Вопросы к зачету

1. Области электромагнитного спектра. Возникновение молекулярных спектров. Спектры поглощения.
2. Классификация методов молекулярной спектроскопии.
3. Электронная спектроскопия органических веществ. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.
4. Взаимосвязь электронных спектров и структуры молекул органических веществ: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах.
5. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров.
6. Электронные спектры основных классов органических веществ.
7. Колебательная спектроскопия органических веществ. Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул.
8. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.
9. Представления о технике эксперимента и методах приготовления проб в ИК-спектроскопии.
10. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических веществ.
11. Принципы масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Отношение массы к заряду. Масс-спектр.
12. Молекулярные предшественники. Стабильные и метастабильные ионы. Фрагментация.

13. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация.  
 14. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами.

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

По дисциплине «Молекулярная спектроскопии биологически активных веществ» используется комплекс учебно-методических материалов в электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролирующую функции. В качестве контролирующей функции комплекс используется для текущего и промежуточного контроля успеваемости и полностью обеспечивает возможность самостоятельной работы студента по материалам дисциплины.

Лабораторные занятия, реализуемые в соответствии с тематическим планированием дисциплины (раздел 4), обеспечены методическими рекомендациями, представленными в печатном или электронном виде.

Оценка теоретических знаний, умений и навыков, сформированных в процессе выполнения лабораторных работ, осуществляется в форме письменного опроса (составная часть отчета по лабораторной работе), выполнения практических заданий и процесса защиты лабораторной работы. Требования к содержанию отчета по лабораторной работе сформулированы в соответствующем разделе каждой лабораторной работы.

Результаты оценивания сформированности знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций фиксируются в БРС дисциплины, итоговый показатель заносится в зачетно-экзаменационную ведомость дисциплины.

#### **Рейтинговая шкала**

<i>Образовательные результаты</i>	<i>Баллы</i>
Тесты (3 x 5)	15
Выполнение и защита лабораторных работ (4 x 10)	40
Контрольная работа (1 x 10)	10
Задания для СРС (1 x 15)	15
Количество баллов в семестре:	<b>80 баллов</b>
Количество баллов на зачете:	<b>20 баллов</b>
Баллы	Итоговая оценка
61-100	зачтено
до 61	не зачтено

### **7. ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

#### **7.1. Основная литература**

1. Васильев, В.П. Аналитическая химия в 2ч. Ч.2. Физико-химические методы анализа [Текст]. М. Высш.школа, 2005г.-351с.
2. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: учеб. пособие / В.И. Васильева [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2014. — 416 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/50168>.

#### **7.2. Дополнительная литература**

1. Основы аналитической химии [Текст]: учебник для студентов химического направления и химических специальностей вузов. В 2 томах / ред. Ю. А. Золотов. - 4-е изд., перераб. доп. - М.: Академия. Т.2. - 2010. - 416 с.

2. Слепченко, Г. Б. Инструментальный анализ биологически активных веществ и лекарственных средств [Электронный ресурс] / Слепченко Г. Б., Дерябина В. И., Гиндуллина Т. М., и др. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2015. -198с. – Режим доступа: URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=442807>
3. Беккер, Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс]: научная монография / Беккер Ю. Издательство: М.: РИЦ "Техносфера", 2009. – 528 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=88994&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=88994&sr=1)
4. Фарус, О. А., Якушева Г. И. Физические и физико-химические методы анализа: лабораторный практикум [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / Фарус О. А., Якушева Г. И. М., Берлин: Издательство: Директ-Медиа, 2015. – 78 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=375309&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=375309&sr=1)
5. Кириллова Е. А., Маряхина В. С. Методы спектрального анализа: учебное пособие [Электронный ресурс] / Кириллова Е. А., Маряхина В. С. Издательство: Оренбургский государственный университет, 2013. – 108 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=258856&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=258856&sr=1)

*Периодические издания:*

1. Вестник Московского университета. Серия 2: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Химический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Москва. 1986-2014. URL: <http://www.chemnet.ru/rus/vmgu/welcome.html>.
2. Вестник БГУ. Серия 2: Химия. Биология. География [Электронный ресурс]: сайт / Белорусский государственный университет. Минск. 1973-2014. URL: <http://www.bsu.by/ru/main.aspx?guid=184121>
3. Вестник Пермского университета. Серия: Химия. [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2011-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=32574>.
4. Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: Физика. Химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1969-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9468>.
5. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет). Челябинск. 2009-2014. URL: <http://www2.susu.ac.ru/ru/science/publish/vestnik>.
6. Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Сибирский федеральный университет. Красноярск. 2008-2014. URL: <http://journal.sfu-kras.ru/home>.
7. Известия Академии наук. Серия химическая [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1961-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7833>.
8. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Физика и химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2001-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=38071>.
9. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2000-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9907>.

10. European reviews of chemical research [Электронный ресурс]: САЙТ / Научная электронная библиотека ELIBRARY. 2014. URL: [HTTP://ELIBRARY.RU/CONTENTS.ASP?TITLEID=51199](http://ELIBRARY.RU/CONTENTS.ASP?TITLEID=51199)

#### **8. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

1. Российское образование [Электронный ресурс]: Федеральный портал. Министерство образования и науки РФ. URL: <http://www.edu.ru>.
2. Федеральный государственный образовательный стандарт [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://standart.edu.ru>.
3. Единое окно доступа к образовательным ресурсам [Электронный ресурс]: информационная система / ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика». – М.: [б. и.], 2005. URL: <http://window.edu.ru>.
4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: информационный портал / ООО «РУНЭБ», Санкт-Петербургский государственный университет. – М.: [б. и.], 2010. URL: [www.eLibrary.ru](http://www.eLibrary.ru).
5. Российское образование [Электронный ресурс]: федеральный портал / ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика». - М : [б. и.], 2002. URL: [www.edu.ru](http://www.edu.ru).
6. Руконт [Электронный ресурс]: национальный цифровой ресурс / ООО «Агентство Книга-Сервис». – М.: [б. и.], 2011. URL: <http://www.rucont.ru>.
7. Университетская библиотека Online [Электронный ресурс] / ООО "Директ-Медиа". - М : [б. и.], 2006. URL: [www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru).
8. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://school-collection.edu.ru>.
9. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://fcior.edu.ru>.
10. Российский общеобразовательный портал [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://www.school.edu.ru>.
11. Каталог образовательных ресурсов сети Интернет для школы [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://katalog.iot.ru>.
12. Химия. Первое сентября [Электронный ресурс]: Учебно-методический журнал для учителей химии и естествознания. - М.: Чистые пруды; ИД "Первое сентября". URL: <http://him.1september.ru>.
13. ChemNet Россия [Электронный ресурс]: портал фундаментального химического образования России / МГУ им. М. В. Ломоносова. - М. : [б. и.], 1997. URL: <http://www.chem.msu.ru>.
14. Издательство "Просвещение" [Электронный ресурс] : информационный сайт / Изд-во "Просвещение". - М. : [б. и.], 2005-2014. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL: <http://www.prosv.ru>
15. Дрофа-Вентана-Граф: объединённая издательская группа. <https://drofa-ventana.ru>.

## 9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине, которую следует использовать для подготовки к лабораторным занятиям и к зачету. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем.

Для успешного изучения дисциплины преподавателем, работающим со студентами по данному курсу, предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- методическое пособие в электронном и печатном виде для лабораторных занятий с контрольными вопросами и задачами;
- задания для самостоятельной работы студентов;
- для контроля знаний по предмету на лабораторных занятиях разработан комплекс текущих тестовых заданий
- для оценки остаточных знаний разработаны тестовые задания
- для контроля знаний и умений предусмотрено проведение контрольных работ и коллоквиумов.

Варианты контрольных работ в печатном виде находятся у преподавателя, ответственного за данную дисциплину.

Основная цель аудиторных занятий по дисциплине состоит в глубоком усвоении наиболее сложных вопросов учебной дисциплины; оказание помощи студенту в изучении, как общетеоретических вопросов, так и в овладении обширным нормативным материалом.

Готовясь к лабораторным занятиям по дисциплине студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подвергнуть их анализу, систематизации и обобщению и подготовить план ответа на каждый вопрос, вынесенный на обсуждение; подготовиться к выполнению лабораторной работы; выполнить задания для самостоятельной работы.

## 10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются информационные технологии, охватывающие ресурсы (компьютеры, программное обеспечение и сети), необходимые для управления информацией (создание, хранение, управление, передача и поиск информации):

- технические средства: компьютерная техника и средства связи (ноутбук, проектор, экран, USB-накопители и т.п.);
- коммуникационные средства (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты, личного кабинета студента и преподавателя);
- организационно-методическое обеспечение (электронные учебные и учебно-методические материалы, компьютерное тестирование, использование электронных мультимедийных презентаций при проведении лекционных и лабораторных занятий);
- программное обеспечение (Microsoft Office (Excel, Power Point, Word и т.д.), Skype, поисковые системы, электронная почта и т.п.);
- среда электронного обучения ТГПУ им. Л.Н. Толстого <http://moodle.tsput.ru>.

### комплект лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Программное обеспечение Microsoft Office XP Professional Win32 Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
4. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г.
5. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
6. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 1894-150512-101810 от 12-05-2015 г.

### современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал "Информационно-коммуникационные технологии в образовании" <http://www.ict.edu.ru>.
5. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
6. База спектральных данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония. Режим доступа: [http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgibin/direct\\_frame\\_top.cgi](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgibin/direct_frame_top.cgi)
7. Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
8. Программное обеспечение: ChemOffice со встроенным генератором спектров ЯМР.

**11. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованные мультимедийными средствами обучения.

2. Учебные аудитории для проведения лабораторных занятий.

3. Компьютерные классы с доступом в интернет для работы с информационно-правовыми системами, в том числе «Гарант» и с доступом к электронно-библиотечной системе.

4. Аудитории для самостоятельной работы студентов, оснащенные компьютерной техникой, имеющей доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронной информационно-образовательной среде ТГПУ им. Л.Н. Толстого, внутривузовскому сетевому окружению.



## 12. АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ.

1. Планируемые результаты обучения при освоении дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

ПК-3 - готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований;

ДПК-1 - знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования;

ДПК-2 - владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений.

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести:

**знания:**

- теоретических основ методов молекулярной спектроскопии (ПК-3);
- структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений и методы их исследования (ДПК-1);
- теоретические основы методов статистической обработки результатов спектрального анализа (ДПК-2)

**умения:**

- применять методы молекулярной спектроскопии для проведения экспериментальных и теоретических научных исследований (ПК-3);
- выбирать и применять различные методы молекулярной спектроскопии для установления структуры, строения и свойств биологически активных и токсических соединений (ДПК-1);
- использовать методы молекулярной спектроскопии и хемометрики для решения конкретных профессиональных задач (ДПК-2)

**навыки:**

- расшифровки и интерпретации данных молекулярной спектроскопии (ПК-3);
- обработки данных молекулярной спектроскопии биологически активных и токсических соединений (ДПК-1);
- владения методикой спектрального анализа биологически активных и токсических соединений, статистической обработки спектральных данных (ДПК-2)

2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина «Молекулярная спектроскопия биологически активных веществ» является дисциплиной по выбору вариативной части Блока 1 учебного плана. Освоение данной дисциплины необходимо для формирования готовности студента к осуществлению научно-исследовательской профессиональной деятельности, прохождения практики по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности.

3. Объем дисциплины: 3 зачетные единицы.

4. Образовательный процесс осуществляется на русском языке.

5. Разработчик: доктор химических наук, профессор, зав. кафедрой химии Атрощенко

Ю.М.

**13. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ****2016-2017 учебный год**

В рабочую программу дисциплины внесены изменения в части обновления состава необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 2 от 16 февраля 2017 г.

**2017-2018 учебный год**

**Обновлен состав необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения.**

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
3. Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian - контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
4. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
5. Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional - контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.
6. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
8. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 17E0-170518-102844-823-690 от 18-05-2017 г.

**Обновлен состав современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.**

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал базы данных правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» <http://www.ict.edu.ru>.
5. Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных <http://webofscience.com>.
6. Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) <http://neicon.ru>.
7. Базы данных издательства Springer <https://link.springer.com>.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Разработчик:

<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Учёная степень</b>	<b>Учёное звание</b>	<b>Должность</b>
Атрощенко Юрий Михайлович	Доктор химических наук	Профессор	Заведующий кафедрой химии