**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**
**имени М.В. ЛОМОНОСОВА**

**ФАКУЛЬТЕТ ПОЧВОВЕДЕНИЯ**

УТВЕРЖДАЮ
и.о. декана П. В. Красильников
/_____/

«  »  202  г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины:**

МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**Уровень высшего образования:**

***Магистратура***

**Направление подготовки (специальность):**

***06.04.02 Почвоведение***

**Направленность (профиль) ОПОП:**

**Химия почв**

**Форма обучения: очная**

Рабочая программа рассмотрена и одобрена учебно-методической комиссией факультета почвоведения (протокол №_____, дата _____ )

---

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки ***06.04.02 Почвоведение*** программы ***магистратуры***

ОС МГУ утвержден решением Ученого совета МГУ имени М.В.Ломоносова от 30 декабря 2020 года (протокол № 1370).

**1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО**: вариативная часть, блок профессиональной подготовки, по выбору, спецкурс.

**2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:**

Базовая часть. «Блок общенаучный»:
высшая математика
физика
общая химия
органическая химия
аналитическая химия
физическая химия
математическая статистика
«Блок общепрофессиональный»:
Почвоведение
Химия почв
Вариативная часть. Блок профессиональный.
Практикум по химии почв
Химический анализ почв

**3. Планируемые результаты обучения в результате освоения дисциплины, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников:**

| Компетенции выпускников (коды) | Индикаторы (показатели) достижения компетенций | Планируемые результаты обучения по дисциплине, сопряженные с компетенциями |
|---|---|---|
| **М-СПК-1, М-СПК-2** | **М-СПК-1.1, М-СПК-1.2 М-СПК-2.1, М-СПК-2.2** | *Знает:* Основы спектроскопии. Оптические свойства окрашенных соединений в растворах. Характер инфракрасных спектров органических и неорганических веществ. Основные характеристики, законы и параметры люминесценции. Области применения флуориметрии в анализе объектов окружающей среды.<br>*Умеет:* Проводить оценку и определять изменения состояния окружающей среды на основе полученных спектральных данных.<br>*Владеет:* методами молекулярной спектроскопии веществ в отсутствие и присутствии мешающих компонентов. Способами подготовки химических растворов и реактивов для спектральных методов анализа. Общими принципами создания и коррекции методик спектрального анализа.<br>*Имеет опыт деятельности:* Пробоподготовки и проведения анализа химического состава воды и почвы. Работы с лабораторным оборудованием, настройки и калибровки спектральных приборов. |

**4.** Объем дисциплины составляет 2 з.е. в академических часах, в том числе 36 академических часов на контактную работу обучающихся с преподавателем, 44 академических часа - на самостоятельную работу обучающихся .

**5. Формат обучения:** семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа обучающихся.

**6. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий**

| **Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины /форма текущей аттестации** | **Всего (часы)** | В том числе | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | **Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем)** | | | | | **Самостоятельная работа обучающегося** | | |
| | | Занятия лекционного типа | Занятия семинарского типа | Занятия семинарского типа (лабораторные) | Занятия семинарского типа (практические) | **Всего** | Анализ литературы, предоставленных преподавателем материалов, решение кейса | Подготовка докладов и/или презентаций | **Всего** |
| Раздел 1. Введение в молекулярную спектроскопию. Электронная спектроскопия | 27 | | 9 | 3 | | 12 | 15 | | 15 |
| Форма текущей аттестации по разделу 1 | ***Коллоквиум, обсуждение на семинаре*** | | | | | | | | |
| Раздел 2. Инфракрасная спектроскопия | 26 | | 9 | 3 | | 12 | 14 | | 14 |
| Форма текущей аттестации по разделу 2 | ***Контрольная работа, опрос*** | | | | | | | | |
| Раздел 3. Молекулярная фотолюминесценция | 27 | | 9 | 3 | | 12 | 6 | 5 | 11 |
| Форма текущей аттестации по разделу 3 | ***Коллоквиум, доклады с презентациями*** | | | | | | | | |
| Промежуточная аттестация | ***экзамен*** | | | | | | 4 | | |

| | | | |
|---|---|---|---|
| **Итого:** | 80 | 36 | 44 |

**Подробное содержание разделов и тем дисциплины:**

РАЗДЕЛ 1. ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНУЮ СПЕКТРОСКОПИЮ. ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Введение. Основы молекулярной спектроскопии. Методы молекулярной спектроскопии.

Тема 1. Электронные спектры поглощения

Основные положения теории. Фотометрические методы анализа, общие положения. Показатели, применение. Спектрофотометрия в УФ- и в видимой области. Оптические свойства окрашенных соединений в растворах. Выбор спектральной области измерений. Светофильтры. Влияние растворителя на измерения. Органические растворители. Чувствительность и воспроизводимость определений. УФ- и видимая спектрофотометрия в анализе объектов окружающей среды.

Тема 2. Фотометрические методы количественного анализа

Фотометрические методы определения веществ в отсутствие мешающих компонентов. Методы определения веществ в присутствии мешающих компонентов.

Тема 3. Аппаратура и методы фотометрического анализа

Общие принципы работы и замечания при работе на фотоколориметрах и спектрофотометрах. Растворы сравнения (нулевые растворы). Фотоэлектроколориметры. Спектрофотометры. Краткие характеристики отечественных УВИ-спектрофотометров и некоторые области их применения. Некоторые модели зарубежных спектрофотометров и аксессуары к ним.

РАЗДЕЛ 2. ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Тема 1. Инфракрасные спектры поглощения

Основные положения теории колебательных спектров. Особенности техники и методики измерения инфракрасных спектров поглощения. Качественный и количественный анализ органических и неорганических веществ по инфракрасным спектрам. Основы Фурье-спектрометрии. Принцип Фурье-преобразования, преимущества, применение. ИК-Фурье спектроскопия диффузного отражения.

Тема 2. Аппаратура и методы ИК-спектрометрии

Краткие характеристики отечественных ИК-спектрометров, области применения. Некоторые модели зарубежных ИК-спектрометров и аксессуары к ним. Основные схемы и принципы работы. Методы подготовки образцов к ИК-спектроскопии.

РАЗДЕЛ 3. МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ

Тема 1. Понятие люминесценции

Природа люминесценции. Виды люминесценции. Основные характеристики люминесценции. Интенсивность люминесценции и концентрации люминофора. Молекулярная фотолюминесценция. Диаграмма Яблонского. Основные закономерности молекулярной люминесценции. Закон Вавилова. Правило Стокса. Правило Каши. Правило Левшина. Время жизни возбужденных состояний молекул. Тушение люминесценции, его виды и причины. Квантовый выход. Виды флуорофоров.

Тема 2. Аппаратура для флуоресцентной спектроскопии

Флуориметры, спектрофлуориметры. Основные схемы и принципы работы. Люминесцентный анализ. Спектры возбуждения и испускания, синхронные спектры флуоресценции. Получение, обработка. Искажения спектров, причины, методы коррекции.

Тема 3. Области применения флуориметрии в анализе объектов окружающей среды

Исследования биопродуктивности водоемов, измерения содержания хлорофилла в фотосинтезирующих объектах, состава и фотосинтетической активности фитопланктона в поверхностных водах. Измерения массовой концентрации неорганических и органических загрязняющих веществ в воде, почве (после перевода в раствор) в целях аналитического и санитарного контроля объектов окружающей среды, контроля технологических процессов.

Практические задачи:

1. Определения строения природных органических соединений методом электронной спектроскопии.
2. Принципы и алгоритмы качественного анализа органических соединений методом ИК-спектроскопии.
3. Способы калибровки спектров флуоресценции.
4. Флуоресценция пигментов. Влияние условий роста растений на характер спектров флуоресценции.

## 7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине

**7.1.** Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Рекомендуемые темы рефератов:

1. Использование электронной спектроскопии при анализе объектов окружающей среды.
2. Современные приборы и оборудование для ИК и УФ-спектрометрии.
3. Применение ИК-Фурье спектрометрии для идентификации и количественного анализа загрязняющих веществ в почвах и природных водах.
4. Использование флуоресценции для изучения нефтяного загрязнения природных сред.
5. Применение флуоресценции для экологического мониторинга состояния водоемов.
6. Современные приборы и оборудование для изучения фотолюминесценции.

**7.2.** Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Раздел 1.
1. Природа электронных спектров поглощения.
2. Количественные закономерности поглощения света веществом.
3. Классификация фотометрических методов по типу используемых реакций.
4. Фотометрические методы в количественном анализе.
5. Спектрофотометрия в УФ- и в видимой области.
6. Оптические свойства органических веществ природных вод.
7. Методы определения веществ в отсутствие мешающих компонентов.
8. Методы определения веществ в присутствии мешающих компонентов.
9. Принципы работы на фотоколориметрах.
10. Принципы работы на спектрофотометрах.
11. Принципы введения поправок на холостой опыт.

Раздел 2.
1. Природа колебательных спектров.
2. Инфракрасные спектры поглощения и их характеристики.
3. Качественный и количественный анализ веществ по ИК-спектрам.
4. ИК-спектры гумусовых веществ почв.
5. Основы Фурье-спектрометрии.
6. Применение ИК-Фурье спектроскопии диффузного отражения.
7. Устройство и принципы работы ИК-спектрометров.
8. Методы подготовки образцов к ИК-спектроскопии.

Раздел 3.
1. Природа люминесценции. Диаграмма Яблонского.
2. Виды люминесценции.
3. Основные характеристики люминесценции.
4. Основные законы молекулярной люминесценции.
5. Тушение люминесценции, его виды и причины.
6. Квантовый выход флуоресценции, расчет и применение.
7. Виды флуорофоров.
8. Устройство и принципы работы спектрофлуориметров.
9. Спектры возбуждения и эмиссии, синхронные спектры флуоресценции.
10. Помехи при флуоресцентном анализе. Эффекты внешнего и внутреннего фильтра.
11. Применение флуориметрии для измерения содержания хлорофилла.
12. Применение флуориметрии для оценки качества вод.
13. Применение флуориметрии для изучения природы органических веществ почв и поверхностных вод.

8. **Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине:**

В таблице представлена шкала оценивания результатов обучения по дисциплине. Уровень знаний обучающегося оценивается на "отлично", "хорошо", "удовлетворительно", "неудовлетворительно".

Оценка "отлично" выставляется, если обучающийся демонстрирует сформированные систематические знания, умения и навыки их практического использования. Оценка "хорошо" ставится, если при демонстрации знаний, умений и навыков студент допускает отдельные неточности (пробелы, ошибочные действия) непринципиального характера. При несистематических знаниях, демонстрации отдельных (но принципиально значимых

навыков) и затруднениях в демонстрации других навыков выставляется оценка «удовлетворительно». Оценка "неудовлетворительно" ставится, если знания и умения фрагментарны, а навыки отсутствуют.

| **ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ результатов обучения (РО) по дисциплине** | | | | |
|---|---|---|---|---|
| Оценка РО и соответствующие виды оценочных средств | **2** | **3** | **4** | **5** |
| **Знания** *(виды оценочных средств: устные и письменные опросы,контрольные работы, тесты)* | Отсутствие знаний | Фрагментарные знания | Общие, но не структурированные знания | Сформированные систематические знания |
| **Умения** *(виды оценочных средств: практические контрольные задания, решение кейсов)* | Отсутствие умений | В целом успешное, но не систематическое умение | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера) | Успешное и систематическое умение |
| **Навыки (владения, опыт деятельности)** *(виды оценочных средств: выполнение лабораторной работы и анализа данных)* | Отсутствие навыков (владений, опыта) | Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта) | В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме | Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач |

**9. Ресурсное обеспечение:**

- Перечень основной и дополнительной литературы:

**Основная литература**

Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии (Раздел 1,2,3). Москва. ВШ. 2003;

Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов (Раздел 1,2,3). Москва. Техносфера. 2007;

Оптические методы анализа объектов окружающей среды и пищевых продуктов (Раздел 1,3). Екатеринбург (электронное издание). 2008;

Сайдов Г.В., Свердлова О.В. Практическое руководство по молекулярной спектроскопии (Раздел 1,2,3) Санкт-Петер-бург.СПб ГУ. 1995;

Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии (Раздел 3). Москва. Мир. 1986.

**Дополнительная литература**

Гармаш А.В. Введение в спектроскопические методы анализа. Оптические методы анализа (Раздел 1,3). Москва. РАН. Высший хим. колледж. 1995;

Вязьмин С.Ю., Рябухин Д.С., Васильев А.В. Электронная спектроскопия органических соединений (Раздел 1). Санкт-Петербург. СПб ГЛТА;

Белл Р.Дж. Введение в Фурье-спектроскопию (Раздел 2). Москва. Мир. 1975;

Тарасевич Б.Н. Основы ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье. Подготовка проб в ИК-спектроскопии (Раздел 2). Москва.МГУ.2012;

Карабашев Г.С. Флюоресценция в океане (Раздел 3).Ленинград. Гидрометеоиздат. 1987.

- Перечень лицензионного программного обеспечения (при необходимости) Ms Office (Power Point)
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем https://webbook.nist.gov/chemistry/name-ser/
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости)

http://www.chem.msu.ru
http://www.ftirsearch.com
http://www.spectroscopynow.com
http://www.nytek.ru

- Описание материально-технического обеспечения:

Помещения:

- учебная аудитория для проведения лекционных занятий и семинарских занятий, оборудованная оргтехникой;
- лабораторные помещения, оборудованные для проведения процедур пробоподготовки и химического анализа проб (оборудованные постоянным источником электрического питания, воды, системой вентиляции, вытяжными шкафами; отвечающие условиям противопожарной безопасности и техническим требованиям, предъявляемым к аналитическим лабораториям).

Оборудование:

- необходимая оргтехника (ЭВМ, проектор и др.);
- оборудование для проведения химического анализа веществ в пробах воздуха, воды и почвы (оборудование для хранения, сушки, гомогенизации и фильтрации проб; оборудование для экстракции и концентрирования проб; потенциометры; спектрофотометры и спектрофлюориметры; инфракрасные спектрометры; весы различных классов точности; вспомогательное лабораторное оборудование; лабораторная посуда и расходные материалы; компьютерное оборудование со специализированными программными модулями).

Иные материалы:

- демонстрационные материалы.

**10. Язык преподавания:** русский

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности «Почвоведение» программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

**11. Преподаватели:**

ФИО Караванова Елизавета Ильинична

Должность доцент

Ученая степень (когда и где присуждена) к.б.н., 1991, Москва, МГУ

Ученое звание (когда и кем присвоено) доцент, 2005, Москва, МГУ

ФИО Завгородняя Ю.А.

Должность доцент
Ученая степень (когда и где присуждена) к.б.н., 2000, Москва, МГУ
Ученое звание (когда и кем присвоено) доцент, 2016, Москва, МГУ

**12. Разработчики программы:**
ФИО Караванова Елизавета Ильинична
Должность доцент
Ученая степень (когда и где присуждена) к.б.н., 1991, МГУ
Ученое звание (когда и кем присвоено) доцент, 2005, МГУ
ФИО Завгородняя Ю.А.
Должность доцент
Ученая степень (когда и где присуждена) к.б.н., 2000, Москва, МГУ
Ученое звание (когда и кем присвоено) доцент, 2016, Москва, МГУ

**13. Краткая аннотация дисциплины:**
Рассматриваются основы молекулярной спектроскопии, методы получения и анализа различных видов молекулярных спектров, природа электронных спектров поглощения, ИК-спектров, спектров люминесценции органических и неорганических веществ, основы теории цветности органических и неорганических веществ, основные законы, правила, термины и понятия, используемые в спектрометрии. Рассматривается явление тушения люминесценции, его виды и причины, понятие квантового выхода. Дается сравнительная характеристика возможностей, преимуществ и ограничений методов молекулярной спектрометрии в УФ, ИК и видимой области. Анализируется применение правил Вудворда-Физера, Скотта для качественного анализа структуры органических соединений. Представлены основы Фурье-спектрометрии, ИК-Фурье спектроскопии диффузного отражения. Предлагаются алгоритмы выбора метода анализа, области и условий измерений, правила подбора растворителей, рассматриваются вопросы специфики пробоподготовки и измерений, метрологические характеристики различных методов спектроскопии. Рассмотрены особенности аналитического оборудования, примеры использования УФ, ИК и видимой спектрометрии при количественном и качественном анализе объектов окружающей среды, в том числе в целях аналитического и санитарного контроля, экологического мониторинга, контроля технологических процессов.