

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Спектральные методы анализа молекул

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки / специализация:
«Фундаментальная и прикладная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1 – Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта;

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

– ИПК-1.1 – Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости;

– ИПК-1.2 – Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить спектральные методы применительно к задачам биофотоники.

– Научиться применять спектральные методы для интерпретации свойств биологических систем и явлений, выработать навыки решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 3, зачет с оценкой.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Математический анализ, Линейная алгебра и аналитическая геометрия, Общая физика, Физическая химия, Информационные технологии.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

– лабораторные работы: 32 ч.;

– в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Введение в электронную спектроскопию.

Основные понятия спектроскопии. Классификация электронных переходов в органических молекулах. Общая схема фотофизических процессов. Закон поглощения света. Классификация межмолекулярных взаимодействий.

Тема 2. Процессы дезактивации энергии возбуждения.

Время жизни возбужденного состояния молекулы. Основные законы процессов дезактивации электронно-возбужденных состояний. Механизмы тушения флуоресценции. Динамическое и статическое тушение. Смешанные тушения. Природа и определение молекулярных характеристик в процессах тушения.

Тема 3. Физические основы ИК- спектроскопии

Описание методов ИК спектроскопии их приложений в биофотонике. Спектрометры высокого разрешения в молекулярной спектроскопии (дифракционная спектроскопия, Фурье-спектроскопия), аналитические возможности спектрометров. Структура и спектры поглощения воды, в том числе в биомедицинских объектах.

Тема 4. Техника и аппаратура спектральных измерений.

Спектральная аппаратура для измерения УФ и ИК спектров. Спектрофотометр. Спектрофлуориметр. Экспериментальные методы регистрации спектров и определения основных спектроскопических характеристик.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения лабораторных работ по материалам курса, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом). Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет с оценкой в 3 семестре проводится в устной форме по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=29216>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Примерные темы лабораторных работ.

Тема 1. Лабораторная работа «Определение характеристик электронных полос поглощения и электронных состояний многоатомных молекул»

Регистрация электронных спектров поглощения многоатомной молекулы на примере органических красителей. Определение основных характеристик электронных полос поглощения (длина волны, оптическая плотность, коэффициент поглощения, полуширина полосы). Построение схемы энергетических уровней молекулы.

Тема 2. Лабораторная работа «Изучение флуоресценции и типов ее тушения»

Регистрация спектров флуоресценции в отсутствие и присутствии тушителя. Определение основных характеристик флуоресценции многоатомной молекулы (длина волны, Стоксов сдвиг). Построение зависимости Штерна-Фольмера, определение типа тушения.

Тема 3. Лабораторная работа «Анализ лекарственных препаратов и растительных масел с использованием ИК спектроскопии»

Зарегистрировать и интерпретировать спектры различных образцов: лекарственных препаратов на примере витамина С и растительных масел, используя различные методы пробоподготовки. Оценить недостатки и преимущества метода электронной и ИК-спектроскопии.

г) Методические указания по проведению лабораторных работ.

Методы УФ- и ИК-спектроскопии в анализе лекарственных препаратов и растительных масел: учебно-методическое пособие по курсу "Методы молекулярной спектроскопии в криминалистике" для студентов физического факультета направления подготовки 030302 - Физика, 030402 - Физика. Фундаментальная и прикладная физика : [для 4-6 курсов] / Том. гос. ун-т, Физ. фак. ; [сост.: Ю. П. Морозова, Т. Ю. Титова, Д. О. Зятков]. - Томск : Издательский Дом Томского государственного университета, 2017. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000581293>

д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента включает:

- углубленное теоретическое изучение разделов курса при подготовке к практическим занятиям;
- подготовку к обсуждению материала, в том числе самостоятельный поиск необходимых источников информации, включая научно-образовательные ресурсы сети Интернет;
- подготовку к зачету.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Беккер Ю. Спектроскопия. - Москва: Техносфера, 2009. - 528 с.
2. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии / Пер. с англ. - М.: МИР, 1985.
3. Введение в фотохимию органических соединений / Под ред. Г. Беккера. - М.: МИР, 1976.
4. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. - М.: МИР, 1969.
5. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии / Пер. с англ. - М.: МИР, 1986.
6. Майер Г.В., Данилова В.И. Квантовая химия, строение и фотоника молекул. - Томск.: Изд. ТГУ, 1984.
7. Мак-Глинн С., Адзуми Т., Киносита М. Молекулярная спектроскопия триплетного состояния. - М.: МИР, 1972.
8. Преч Э. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных / Э. Преч, Ф. Бюльман, К. Аффальтер. - Пер. с англ. - Москва: Мир, Бином, Лаборатория знаний, 2006. - 438 с.
9. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия / Пер. с англ. - М.: МИР, 1982.
- Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов - Москва: Техносфера, 2007. - 368 с.

б) дополнительная литература:

1. Бахшиев Н.Г. Фотофизика дипольных взаимодействий: Процессы сольватации и комплексообразования. - СПб: Изд-во СПбГУ, 2005. - 500 с.
2. Бюльман, К. Аффальтер. - Пер. с англ. - Москва: Мир, Бином, Лаборатория знаний, 2006. - 438 с.
3. Молекулярная спектроскопия. Лабораторный практикум: Учебные пособие / Под ред. Г.В. Майера, В.Н. Черепанова. - Томск: ТГУ, ТМЛ-Пресс, 2010. - 416 с.
4. Морозова Ю.П., Жаркова О.М., Королев Б.В. Спектрально-люминесцентные свойства многоатомных молекул и межмолекулярные взаимодействия. - Томск: ТГУ, 2006. - 136 с.

5. Пейнтер П., Коулман М., Кениг Дж. Теория колебательной спектроскопии. – М.: МИР, 1986.
6. Рабек Я. Экспериментальные методы в фотохимии и фотофизике молекул. Том 1, 2. / Пер. с англ. – М.: МИР, 1985.
7. Рамбиди Н.Г., Березкин А.В. Физические и химические основы нанотехнологий. – М.: Физматлит, 2008. – 456 с.
8. Теренин А.Н. Фотоника молекул красителей. – Ленинград.: Наука, 1967.
9. Тиноко И., Зауэр К., Венг Дж., Паглиси Дж. Физическая химия. Принципы и применение в биологических науках. – Москва: Техносфера, 2005. – 744 с.
10. Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений / Г.В. Майер, В.Я. Артюхов и др. – Новосибирск.: Наука, 1997.

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook); системы компьютерной верстки LaTeX; системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, Waterloo Maple;

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ	–
http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system	

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ	–
http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index	

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения практических занятий, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате, оснащенные системой («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Брянцева Наталья Геннадьевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ, научный сотрудник лаборатории фотофизики и фотохимии молекул.