

**ЭЛЕМЕНТ ИССЛЕДОВАНИЯ В РАМКАХ ОБУЧЕНИЯ
ПО ПРОГРАММАМ ПОДГОТОВКИ СТУДЕНТА-БИОФИЗИКА**

Головченко И.В.

Севастопольский государственный университет
ул. Университетская, 33, г. Севастополь, 299053, РФ
e-mail: golovchenko.igor1991@gmail.com

Аннотация. Работа посвящена анализу поведения научного руководителя при попытке формирования у обучающегося компетенций, связанных с проведением научно-исследовательской работы. В качестве примера приводится поэтапный разбор дипломной работы по определению параметров комплексообразования фуллерена C_{60} с молекулой кофеина в водном растворе с помощью ИК-спектрометра. Акцент делается на ходы, направленные на максимизацию индивидуальной, а главное, продуктивной работы студента.

Ключевые слова: ИК-спектрометрия, кофеин, фуллерен C_{60} .

**ELEMENT OF RESEARCH WITHIN THE FRAMEWORK OF STUDING PROGRAMS
OF THE BIOPHYSICS STUDENTS**

Sevastopol State University

Universitetskaya str., 33, Sevastopol, 299053, Russia
e-mail: golovchenko.igor1991@gmail.com

Abstract. The work is devoted to the analysis of the behavior of the scientific tutor in an attempt to form the competencies related to the research work. As an example it is proposed a step-by-step analysis of the thesis on the determination of complexation parameters of C_{60} fullerene with a caffeine molecule in an aqueous solution by means of an IR spectrometer. The emphasis is on the moves aimed to maximize the individual, and most importantly, the productive work of the student.

Key words: IR spectroscopy, caffeine, C_{60} fullerene.

Одной из основных задач при подготовке компетентного специалиста в естественнонаучной области является приобщение обучающегося к самостоятельной постановке и последующему проведению целесообразного эксперимента в рамках определённого проекта. Само собой разумеется, что без качественной фундаментальной подготовки в этом вопросе далеко не продвинуться, но, тем не менее, далеко не каждый студент, хорошо проявивший себя при освоении базовых дисциплин, имеющий опыт работы с соответствующими экспериментальными установками и т.д., находит себя непосредственно в научной работе.

Основным «тормозящим» фактором для большинства студентов является отсутствие пошаговой инструкции к запланированной работе, ведь реальный эксперимент далеко не всегда идёт по шаблону и требует творческого подхода к решению поставленной задачи в отличие от большей части лабораторно-практических работ входящих в учебную программу подготовки. Несомненно, каждый обучающийся требует индивидуального подхода и с разностью, а главное, эффективностью усваивает материал и делает вывод из сложившейся ситуации. Из вышесказанного следует, что найти какие-либо универсальные подходы к обучению довольно трудно, и всё же постараемся определиться с путями устранения оговоренных проблем.

Прежде всего, трудности с усвоением новой для студента методики и овладение тонкостями проведения исследования. Не стоит надеяться, что студент, особенно в рамках ограниченного по времени курса, в достаточной мере овладеет методикой работы, а также будет качественно воспроизводить её и анализировать полученные результаты уже по окончании обучения, даже в случае удовлетворительных показателей на первых парах. Успех студента может быть вызван добросовестным копированием действий руководителя или поиску научных материалов, связанных с объектом исследования и позволяющим сделать выводы о нём и без проведения каких-либо дополнительных измерений. Быть хоть в какой-то мере убежденным в обратном можно лишь в случае, если студент применил в рамках работы нестандартную методику, граничащую с авторской, или проявил самодостаточность. Но статистика говорит о том, что подобное демонстрируют единицы. Так каким же образом подтолкнуть студента к проведению квалифицированного исследования и анализу результатов так, чтобы он выполнял творческую работу?

В качестве примера рассмотрим работу студента бакалавра по исследованию особенностей комплексообразования фуллерена C_{60} (см. рис. 1 А) с молекулой кофеина (см. рис. 1 Б) в водном растворе с помощью ИК-спектрометра.



Рисунок 1 – Структуры А: фуллерена C₆₀ и Б: кофеина

На ИК-спектрах водного раствора чистого кофеина, а также раствора кофеина в присутствии фуллерена C₆₀ наблюдалось смещение пиков кофеина в области 1500-1700 см⁻¹ (см. рис. 2). И, соответственно, главной задачей стала интерпретация полученных данных.

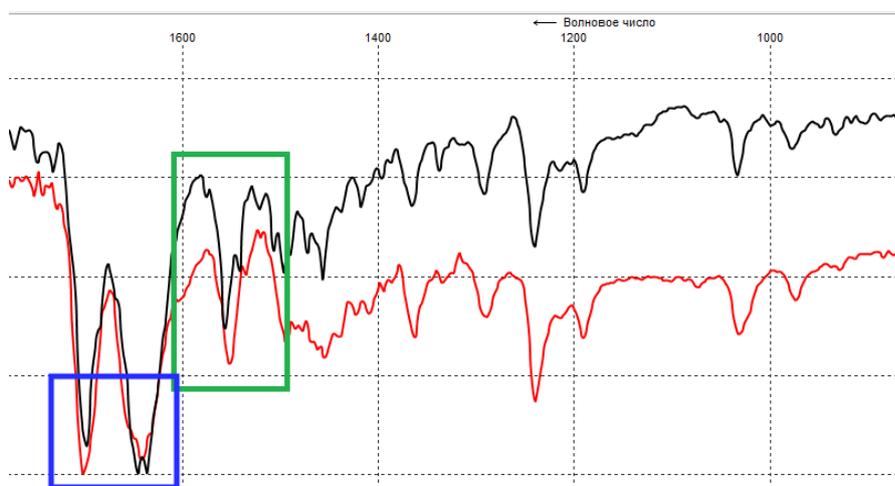


Рисунок 2 – Спектры водного раствора кофеина с фуллереном C₆₀ (красный) и водного раствора чистого кофеина (черный)

В первую очередь, нужно связать и провести пересечения предстоящей работы с уже имеющимся у студента багажом знаний и умений. В частности, в настоящее время ни одна образовательная программа не может обходиться без дисциплин, в основе которых лежит обучение работы в виртуальной среде, или, проще говоря, компьютерному моделированию и симуляции различного рода процессов. Хорошим подспорьем для студента в понимании процесса проведения эксперимента и получения практических результатов будет параллельная компьютерная симуляция, которая к тому же будет являться и верификацией.

Одной из профессионально ориентированных программ, с которыми происходит знакомство в рамках обучения, является HyperChem. Исходя из этого, было решено сравнить реальные спектры растворов (см. рис. 3) и их смоделированные колебательные спектры (см. рис. 4).

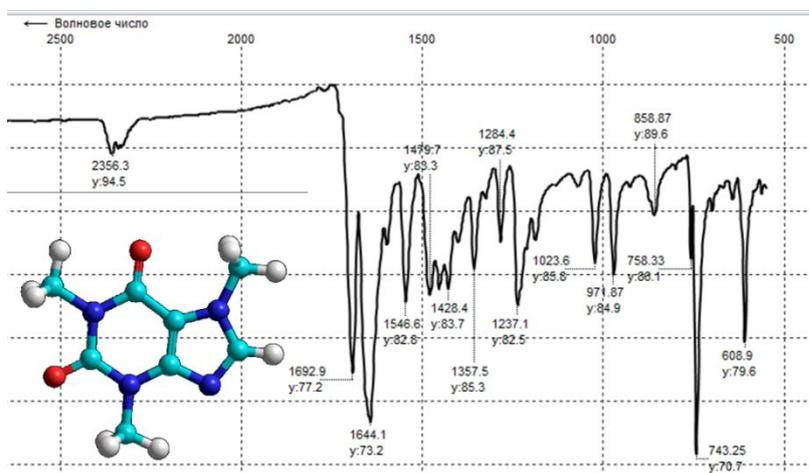


Рисунок 3 – ИК-спектр порошкового кофеина

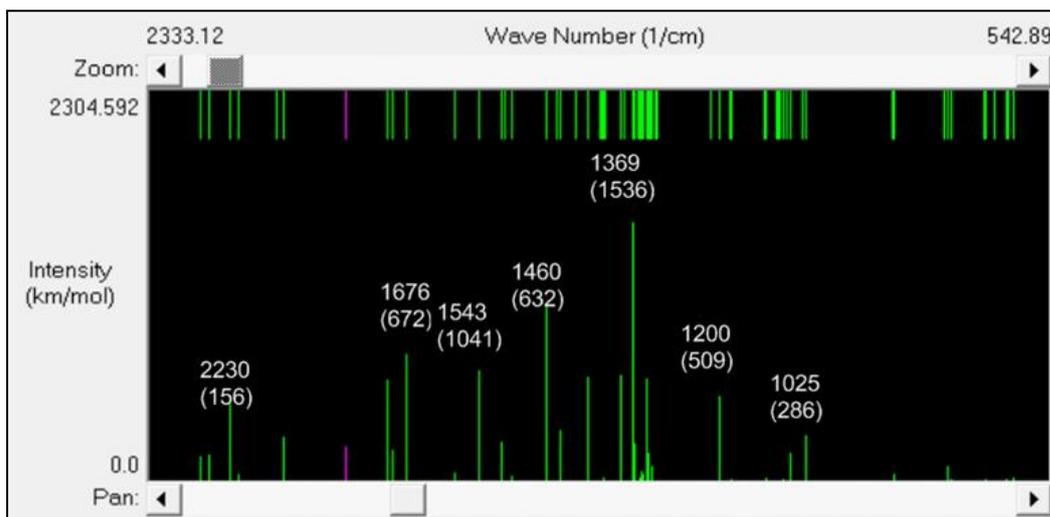


Рисунок 4 – Колебательный спектр молекулы кофеина полученный в HyperChem

Особое внимание было уделено упомянутому ранее региону. Спектры аналогичным раствором продемонстрировали высокую степень совпадения. Пример данных приведён в таблице 1.

Таблица 1 – Спектральные параметры водного раствора кофеина

ИК спектр		Колебательный спектр в HyperChem	
Волновое число, cm^{-1}	Пропускание, %	Волновое число, cm^{-1}	Интенсивность
2356	94.5	2230	156
1644	73.2	1676	672
1546	82.8	1543	1041
1479	83.3	1460	632
1357	85.3	1369	1536
1237	82.5	1200	509
1023	85.8	1025	286

Данные показали, что фуллерен C_{60} не даёт пиков в рассматриваемой области, что было подтверждено результатами компьютерного моделирования в программе HyperChem. Соотнесение пиков кофеина было сделано на основании работы [1], посвящённой исследованию производных кофеина (см. рис. 5, табл. 2).

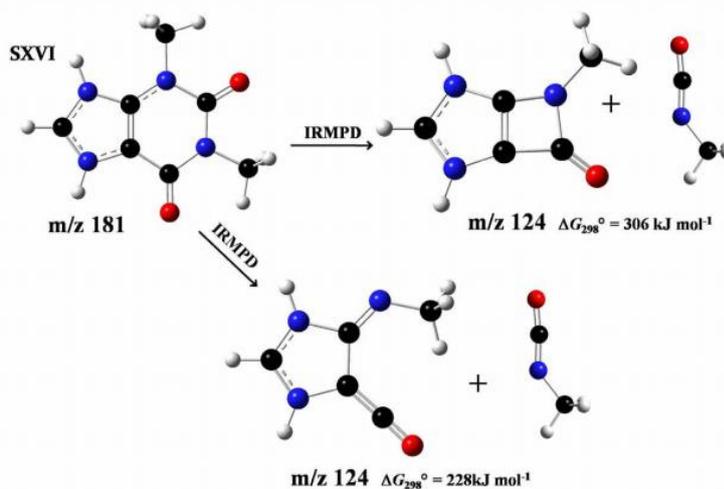


Рисунок 5 – Схема превращений протонированного теофилина [1]

Таблица 2 – Волновые числа (в см^{-1}), соответствующие колебаниям различных атомных групп у производных кофеина [1]

Колебания	IRMPD	SVII	SXXXIX	SXXX
C(2)=O (продольные)	1757	-	1789	-
C(2)=O-H ⁺ (поперечные)	-	1662	-	-
C(2)=O-H ⁺ (продольные)	-	1593	-	1611
N(9)-H ⁺ (вращение)	1675	-	-	-
N(7)=H (вращение)	-	-	-	1637
C(6)=O (продольные)	1591	-	1653	-
NH ₄ (поперечные)	1446	-	1515	1593

По итогам работы студентом были сделаны следующие выводы:

а) чистый раствор фуллерена C₆₀ не дает пиков в рассматриваемой области спектра, что исключает их наложение со спектром кофеина. Следовательно, наблюдаемые сдвиги пиков ИК-спектра раствора комплекса кофеин-фуллерен C₆₀ не могут быть вызваны простым взаимным перекрытием и свидетельствуют о возникшей связи между молекулами данного комплекса;

б) сдвиги пиков на ИК-спектрах растворов комплекса кофеин-фуллерен C₆₀ и чистого кофеина происходит в области 1500-1700 см^{-1} , соответствующей колебаниям C=O и O-H⁺, из чего можно сделать вывод о наличии взаимодействия между кофеином и фуллереном C₆₀ через водородную связь.

Таким образом, пересечение новых для студента методик с уже освоенными им в рамках учебных дисциплин позволяет значительно упростить интегрирование студента в новую для него среду. И работа руководителя свободится главным образом к грамотному направлению студента к выбору дополнительных (порой даже не очевидных) инструментов исследования или анализа, которые облегчат для студента понимание объекта исследования, но при этом не будут препятствовать освоению новых знаний, умений и навыков.

Список литературы / References:

1. Marta R.A., Wu R., Eldridge K.R., Martensa J.K., McMahon T.B. Infrared vibrational spectra as a structural probe of gaseous ions formed by caffeine and theophylline. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2010, vol. 12, iss. 14, pp. 3431-3442.