

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

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
А.С. Князев

« 08 » апреля 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Избранные главы органической химии

специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.1.ДВ.01.04.06

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

В.В. Хасанов

Томск – 2022

Модуль I. Масс-спектрометрия

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;

– ОПК-2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов;

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии;

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;

ИОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности;

ИОПК-2.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности;

ИОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе.

2. Задачи освоения дисциплины

– Научиться понимать физические основы метода получения масс-спектральной информации при различных вариантах ионизации и возможности применения метода тандемной масс-спектрометрии в режиме SRM и MRM для решения аналитических задач без предварительного хроматографического разделения;

– Освоить современное аппаратное оформление метода и возможности применения органической масс-спектрометрии для исследования продуктов каталитической термодесорбции органических соединений; представлять возможности применения тандемной масс-спектрометрии для изучения механизма протекания органических реакций в газовой фазе.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Органическая химия.

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

Семестр 9, зачет.

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 дисциплинам обязательной части профессионального блока естественнонаучного и

математического цикла (физика, химия, математика) и опирается на освоенные при изучении данных дисциплин знания и умения.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость модуля составляет 2 з.е., 72 часов:

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Физические основы метода масс-спектрального распада органических соединений в режиме электронной ионизации.

Основные принципы образования масс-спектров положительно заряженных ионов. Понятие «сечение ионизации». Понятие «полный ионный ток» (ПИТ). Зависимость эффективности ионизации от энергии ионизирующих электронов. Понятие «молекулярный ион». Правильность выбора молекулярного иона на основании первичных фрагментных ионов. Принципы и приемы определения области молекулярно-массового распределения. Понятие «осколочные и характеристические ионы». *Физические основы масс-спектрально распада*. Диаграмма Вархафтига. Понятие метастабильные ионы и принципы их образования. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Правила распада четноэлектронных ионов. Правило степеней свободы. Структурные и стереохимические факторы, влияющие на образование масс-спектра. Органические вещества с полиизобарными молекулярными массами.

Тема 2. Практические основы интерпретации масс-спектров.

Определение элементного состава ионов на основании изотопных пиков. Расчет изотопной частоты соединений. Азотное правило. Фрагментные ионы. Наиболее интенсивные ионы в масс-спектре. Гомологические серии ионов. Построение схемы фрагментации. Метод масс-фрагментографии и режим мониторинга заданных ионов. Масс-спектрометрия высокого разрешения.

Тема 3. Системы ввода образца в ионный источник масс-спектрометра.

Баллон напуска. Применение баллона напуска для изучения структурно-группового состава жидких органических смесей. Прямой ввод. Применение прямого ввода для анализа термолабильных соединений и моделирования каталитических превращений с использованием модельных соединений в режиме программируемой термодесорбции. Изучение кинетики нестационарных процессов в гетерогенном катализе.

Тема 4. Альтернативные методы ионизации органических соединений.

Химическая ионизация и механизм ее протекания. Химическая ионизация отрицательных ионов и возможности ее применение в прикладных исследованиях. Полевая ионизация и полевая десорбция. Особенности применения методов для получения масс-спектров молекулярных ионов и изучения высокомолекулярных соединений различной природы. Химическая ионизация при атмосферном давлении для изучения строения неполярных органических молекул. Электрораспылительная ионизация как метод изучения полярных органических соединений. Принципы образования молекулярных и кластерных ионов. Применение метода для исследования органических реакций в газовой фазе и органических комплексов, образованных по донорно-акцепторному механизму. Образование многозарядных ионов и возможность применения метода для изучения природных и синтетических биополимеров.

Тема 5. Методы разделения и регистрации ионов в органической масс-спектрометрии.

Принцип работы магнитного секторного масс-спектрометра, двухфокусного секторного масс-спектрометра. Квадрупольный анализатор. Ионная ловушка и времяпролетный анализатор высокого разрешения. Детектирование ионов. Принцип работы электронного умножителя и фотоумножителя.

Тема 6. Tandemная масс-спектрометрия MS/MS с использованием активации анализируемых веществ соударения.

Физические принципы активации ионов соударением или диссоциацией, индуцированной столкновением. Принцип работы системы трех квадруполей. Получение спектра дочерних и родительских ионов. Работа в режиме образования ионов, получаемых отщеплением идентичных нейтральных фрагментов. Съемка образца в режиме мониторинга выбранной реакции (SRM) и мониторинга множественных реакций (MRM), как способ повышения чувствительности и селективности анализа микропримесей органических и биологически активных соединений из сложных органических и биологических матриц без предварительного хроматографического разделения. Принцип работы ионной ловушки и возможности ее применения для проведения многостадийных исследований фрагментации в режиме (MS)ⁿ. Достоинства и недостатки метода. Tandemная масс-спектрометрия высокого разрешения. Особенности применения тандемной масс-спектрометрии в режиме электронной и электрораспылительной ионизации.

Тема 7. Количественный масс-спектральный анализ.

Съемка образца в режиме мониторинга заданных ионов с использованием метода внутреннего стандарта, как основной способ проведения количественных расчетов в методе органической масс-спектрометрии и ГХМС. Понятие «относительные коэффициенты чувствительности» и их применение в масс-спектрометрии для количественных расчетов. Метод мониторинга выбранной реакции (SRM) и мониторинга множественных реакций (MRM), как способ проведения количественных расчетов в методе тандемной масс-спектрометрии. Особенности проведения количественных расчетов многокомпонентных смесей в одном эксперименте.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения домашних заданий, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет проводится в устной форме по билетам. Билет содержит теоретические вопросы и расчётные задания. Продолжительность подготовки по билету зачета 1 час.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Вопрос 1. Оцените интенсивности первичных фрагментных ионов, образующихся молекулярным ионом перечисленных ниже соединений: бутилметилэтиламин, 3-метилгептанол-3, втор-пентилизобутилэтиламин при потере алкильных фрагментов.

2. Вопрос 2. Определите интенсивность пика M+6 по отношению к M в масс-спектре соединения содержащего 4 атома хлора, 2 атома хлора и 3 атома брома.

3. Вопрос 3. Возможности масс-спектрометрия высокого разрешения при анализе сложных органических объектов без предварительного разделения.

Примеры расчётных заданий:

1. Задание 1. Определите соотношение интенсивностей молекулярного и изотопных пиков соединения содержащего 7 атомов углерода, 6 атомов углерода и один атом хлора.

2. Задание 2. Рассчитайте соотношения интенсивностей молекулярного и изотопных пиков для следующих соединений: хлороформ, дихлорэтан и дибромметан.

По результату ответа на вопросы билета оценивается сформированность компетенций ОПК-1 и ОПК-2 (не менее 3 баллов) Компетенции считаются сформированными, если студент усвоил более 60 % изучаемого материала. «Зачёт» ставится, если результат формирования компетенций по критериям оценивания не ниже «3-5 баллов» из максимальных 5 баллов.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=33436>

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

в) План практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии / А. Т. Лебедев. М. : Техносфера, 2015. – 704с.

– Экман Р. Масс-спектрометрия: аппаратура, толкование и приложения / Р. Экман, Е. Зильеринг, Э. Вестман-Бринкмальм, А. Край. М : Техносфера, 2013. – 368с.

– Принципы масс-спектрометрии в приложении к биомолекулам /под ред. Дж. Ласкин, Х. Лифшиц. М. : Техносфера, 2012. – 607 с.

б) дополнительная литература:

– Лаваньини И. Количественные методы в масс-спектрометрии / И. Лаваньини, Ф. Маньо, Р. Сералья, П. Тральди. М : Техносфера, 2008. – 175 с.;

– Введение в хромато-масс-спектрометрию / Пер. с англ. И. А. Ревельского, Ю. С. Яшина Карасек, Френсис. М. : Мир, 1993. – 240 с.;

– Органическая масс-спектрометрия: Термохимическое описание изомеризации и фрагментации ионов и радикалов в газовой сфере /В. В. Тахистов; АН СССР, Отд-ние физиологии Тахистов В.В. – В. : Наука, Ленингр. отд-ние, 1990. – 220 с.;

– Хмельницкий Р. А. Масс-спектрометрия загрязнений окружающей среды / Р. А. Хмельницкий, Е. С. Бродский М. : Химия, 1990. – 181 с.;

– Полякова А. А. Масс-спектральный анализ смесей с применением ионно-молекулярных реакций / А. А. Полякова, И. А. Ревельский, М. И. Токарев М. : Химия, 1989. – 240 с.;

– Чепмен Дж. Практическая органическая масс-спектрометрия /Дж. Чепмен; Перевод с англ. А. Т. Лебедева, Дж. Р. Чепмен М. : Мир, 1988. – 216 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии / А. Т. Лебедев М. : БИНОМ. Лаб. знаний, 2003. – 493 с., <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000192021/000192021.pdf>

– Вульфсон Н. С. Масс-спектрометрия органических соединений / Н. С. Вульфсон, В. Г. Заикин, А. И. Микая М. : Химия, 1986. – 287с.

<http://sun.tsu.ru/limit/2016/000079889/000079889.djvu>

Хмельницкий Р. А., Хромато-масс-спектрометрия / Р. А. Хмельницкий, Е. С. Бродский М. : Химия, 1984. – 210 с. <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000138516/000138516.djvu>

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 On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
– 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 занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, 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 занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

Лаборатории оснащены вытяжными шкафами и необходимым оборудованием: ВЭЖХ система ThermoFinnigan Surveyor, масс-спектрометрический детектор: Thermo Finnigan LCQ Advantage MAX (ионная ловушка с электроспреем ESI+).

15. Информация о разработчиках

Дычко Константин Александрович, канд. хим. наук, доцент, кафедры органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Модуль II. Ресурсосберегающие технологии

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;
- ОПК-2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности;
- ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках;
- ПК-2. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов;

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии;

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;

ИОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности;

ИОПК-2.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности;

ИОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе.

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

ИПК-2.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.

ИПК-2.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

2. Задачи освоения дисциплины

-ознакомить с состоянием энергетической и сырьевой базы химической промышленности в России и мире,

-раскрыть современные направления и тенденции развития международной концепции устойчивого развития, идеологии создания безотходных технологий,

-научить применять основы системного подхода к организации безотходных, энергосберегающих экологизированных химических технологий.

-освоить начальные общепрофессиональные компетенции в ресурсосбережении, ознакомление с особенностями и примерами ресурсосберегающих технологий.

-научится планировать и прогнозировать ресурсосберегающие этапы отдельных химических технологий

-получить базовые знания и навыки использования фундаментальных химических понятий при решении теоретических и экспериментальных задач по ресурсосбережению.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Модуль относится к Дисциплине «Избранные главы органической химии» относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Органическая химия.

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

Семестр 9, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия, физическая химия, высокомолекулярные соединения, химическая технология.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость модуля составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

– лекции: 16 ч.;

– практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Научно-технический прогресс и деградация природных систем. Анализ статистических данных о потреблении воды, энергетических и сырьевых ресурсов при организации химико-технологических процессов, о росте деградированных земель, вторичных пустынь, свалок, захоронений токсичных веществ. Тенденции роста мощности техносферы.

Тема 2. Стратегия взаимодействия общества и природы. Связь энергетических и сырьевых потерь с загрязнением окружающей среды Основные коэффициенты и показатели экологизации, ресурсо- и энергосбережения технологии и предприятия. Системный подход к разработке и организации ресурсосберегающих технологий. Отходы производства и потребления, вторичные материальные ресурсы (ВМР). Создание безотходных производств. Методы складирования, захоронения и обезвреживания отходов. Экологическая эффективность природоохранных мероприятий. Примеры малоотходных и безотходных производств в химической промышленности.

Тема 3. Комплексное использование сырья. Рециркуляция сырьевых и энергетических ресурсов в химической технологии. Рециклинг. Основные принципы использования энергии на современном производстве. Тепловые и горючие вторичные энергетические ресурсы. Альтернативные источники сырья и энергии.

Тема 4. Классификация природных ресурсов. Понятие рационального природопользования. Проблемы рационального использования ресурсов России. Подготовка индивидуального задания

Тема 5. Классификация ресурсосберегающих технологий. Безотходные (каскадные), малоотходные, утилизация. Подготовка индивидуального задания

Тема 6. Обзор технологий переработки природных и попутных газов. Передел природных и попутных газов и его место в химической отрасли России. Получение метанола и ПНГ и природного газа. Получение синтетической нефти. Получение моторных топлив. Подготовка презентации

Тема 7. Альтернативные ресурсосберегающие технологии. Применение частных случаев рационального использования ресурсов в химической промышленности, в частности в малотоннажных установках и в быту.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций, проведения занятий с презентациями студентов по индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в девятом семестре проводится в устной форме в виде защиты индивидуального задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории, проверяющие компетенции ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2.

Результаты презентации определяются оценками «зачтено» или «не зачтено».

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы; содержание ответа изложено логично и последовательно; существенные фактические ошибки отсутствуют; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов билета. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов при защите индивидуального задания; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более, чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя и студентов. «Не зачтено» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя и студентов.

Примерный перечень тем индивидуальных заданий

1. Альтернативные источники энергии. Солнечная энергетика. Материалы и технологии преобразования солнечной энергии.
2. Отходы химических производств и вторичные материальные ресурсы.
3. Рециклы и замкнутые оборотные циклы материальных потоков - основа ресурсосберегающей технологии.
4. Регенерация технологических вод.
5. Получение и использование сорбентов на основе отходов и техногенных материалов.
6. Проблемы регенерации неводных растворителей.
7. Безотходное производство – основа разработки экологизированных технологий.
8. Экологический аспект в ресурсосберегающих технологиях.
9. Перспективы развития рационального природопользования в России.
10. Возможные варианты переработки природных и попутных газов.
11. Экологический контроль обстановки при добыче газового и нефтяного сырья в Сибири.
12. Альтернативные методы рационального использования возможных ресурсов.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=28515>

б) Перечень тем индивидуального задания (темы рефератов).

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Белов С. В. Техногенные системы и экологический риск : Учебник для вузов / С. В. Белов. Москва : Юрайт, 2022. – 434 с. - (Высшее образование). URL: <https://urait.ru/bcode/490060>. URL: <https://urait.ru/book/cover/4D797F3E-021F-4F42-BDB8-E1F099A301B4>

- Ларионов Н. М. Промышленная экология : Учебник и практикум для вузов / Н. М. Ларионов, А. С. Рябышенков. Москва : Юрайт, 2022. – 441 с. - (Высшее образование). URL: <https://urait.ru/bcode/488228>. URL: <https://urait.ru/book/cover/3182A7F2-D174-4344-9E39-99D3F23774E2>

- Зеньков И. Топливо-энергетический комплекс России из космоса. Угольные разрезы, тепловые станции, промышленная экология : Монография. - Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2019. – 616 с. URL: <http://znanium.com/catalog/document?id=381966>. URL: <http://znanium.com/cover/1830/1830772.jpg>

- Акинин Н. И. Экологическая безопасность : принципы, технические решения, нормативно-правовая база : [учебное пособие для студентов вузов по направлению подготовки "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии"] / Н. И. Акинин. - 3-е, перераб. и доп. изд.. - Долгопрудный : Интеллект, 2019. – 285, [1] с.: ил., табл.

- Чугунова М. В. Химия нефти и газа : учебное пособие : [для студентов вузов, обучающихся по направлениям подготовки 21.03.01 Нефтегазовое дело, 18.03. 01 Химическая технология, 18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии] / М. В. Чугунова. - Ростов-на-Дону : Феникс, 2019. – 174 с.: табл., ил. - (Серия "Высшее образование")

б) дополнительная литература:

- Progress in Clean Energy, Volume 2 electronic resource : Novel Systems and Applications / /edited by Ibrahim Dincer, C. Ozgur Colpan, Onder Kizilkan, M. Akif Ezan.Cham : Springer International Publishing : Imprint: Springer. 2015

- Colloidal Dispersions Under Slit-Pore Confinement electronic resource /by Yan Zeng. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg : : Imprint: Springer. 2012.

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 On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– 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

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для проведения защиты индивидуальных заданий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

15. Информация о разработчиках

Егорова Лидия Александровна, канд. хим. наук, ст. науч. сотр., кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Сидорова Ольга Ивановна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Модуль III. Ядерно-магнитный резонанс

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК–1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;
- ОПК–2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности;
- ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках;
- ПК-2. Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов;

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии;

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;

ИОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности;

ИОПК-2.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности;

ИОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе.

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

ИПК-2.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными.

ИПК-2.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

2. Задачи освоения дисциплины

- освоить основные понятия и закономерности ЯМР-спектроскопии;
- получить базовые навыки определения структуры органического соединения методом ЯМР;
- научить применять метод ЯМР для решения аналитических задач.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Модуль относится к Дисциплине «Избранные главы органической химии» относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Органическая химия.

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

Семестр 9, зачет с оценкой.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия, физическая химия, высокомолекулярные соединения, химическая технология.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуль III)

Общая трудоемкость модуля составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

– лекции: 16 ч.;

– лабораторные работы: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Основы метода ядерного магнитного резонанса. Классическая и квантовомеханическая модели ЯМР. Условие ЯМР.

Тема 2. Интегральная интенсивность в ПМР-спектрах.

Тема 3. Химический сдвиг. Эмпирические соотношения между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Влияние магнитной анизотропии на химический сдвиг. Аддитивные схемы для химических сдвигов алканов, алкенов, аренов. Влияние растворителя на химический сдвиг.

Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ), его природа. Мультиплетность сигналов. Константы ССВ.

Тема 5. Классификация спиновых систем. Анализ спектров АВ.

Тема 6. Методы упрощения сложных спектров. Динамические эффекты. Особенности спектров спиртов и соединений, содержащих аминогруппу.

Тема 7. Особенности ЯМР-спектроскопии на других ядрах. Спектроскопия ЯМР ^{13}C , ЯМР ^{19}F .

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций, проведения занятий с презентациями студентов по индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет с оценкой в девятом семестре проводится в устной форме по билетам. Билет содержит теоретические вопросы и практические задания, проверяющие компетенции ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2. Продолжительность подготовки по билету 1 час.

Примеры билетов компетентностного характера для устного промежуточного контроля (зачет с оценкой) в аудитории.

Билет № 8.

1. Особенности ПМР-спектров спиртов.

2. Вещество $C_6H_{10}O_4$ имеет следующий спектр ПМР (δ , м.д.): 1,25 (триплет) и 4,4 (квадруплет) с соотношением интенсивностей сигналов 3:2. Установите структуру соединения.

3. Постройте теоретические ЯМР ^{13}C – спектры п-этилбензойной кислоты с полным подавлением и неполным подавлением спин-спинового взаимодействия.

Билет № 4

1. Особенности спектроскопии ЯМР ^{13}C .

2. Напишите структуру соединения C_4H_9Br , которому соответствуют следующие параметры ПМР-спектра (δ , м.д.): 1,05 (дублет, 6H); 1,95 (мультиплет, 1H); 3,35 (дублет, 2H).

3. Каким будет общий вид спектров ПМР дейтерированных аналогов нитроэтана: $CH_3CD_2NO_2$ и $CD_3CH_2NO_2$?

По результатам ответа на вопросы билета оценивается сформированность соответствующих компетенций ПК-1, ПК-2.

Вопросы билета оцениваются следующим образом, исходя из максимальных 5 баллов:

1 вопрос – 1,5 балла

2 вопрос – 1,75 балла

3 вопрос – 1,75 балла.

Ответ оценивается по следующей шкале:

4,5 -5 баллов – «отлично»

3,6 -4,4 балла – «хорошо»

2,8 – 3,5 балла – «удовлетворительно»

Менее 2,8 баллов – «неудовлетворительно».

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=33437>

б) Перечень тем индивидуального задания (темы рефератов).

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Евстигнеев М. П., Лантушенко А. О., Костюков В. В. Основы ЯМР: Учебное пособие. М. : Вузовский учебник, 2015. – 247 с. <https://chem.tsu.ru/sites/default/files/B1>.

- Устынюк Ю. А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Ч.1 (вводный курс). М. : ТЕХНОСФЕРА, 2016. – 288 с. <https://www.chem.msu.ru/rus/books/ustynyuk>.

б) дополнительная литература:

- Нифантьев И. Э., Ивченко П. В. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Метод. разраб. МГУ. М : – 2006. – 197 с.

- Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. – 478 с.

- Вольвенко Ю. М., Карцев В. Г., Комаров И. В., Туров А. В., Хиля В. П.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. М. : Научное партнерство, 2011. – 704 с.

- Рэй Фримен. Магнитный резонанс в химии и медицине. М. : Красанд, 2009. – 331 с.

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 On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- 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

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для проведения защиты индивидуальных заданий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

15. Информация о разработчиках

Кравцова Светлана Степановна, канд. хим. наук, доцент, кафедра органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.