

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

Рабочая программа дисциплины

Физико-химические методы исследования

по направлению подготовки / специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

химик-специалист, преподаватель

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии;

ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;

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-6. Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.

РООПК 1.2 Умеет систематизировать и интерпретировать результаты экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования

РООПК 2.3 Умеет проводить стандартные синтезы по готовым методикам, выполнять стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов, а также использовать серийное научное оборудование для изучения их свойств

РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий

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

РОПК 6.1 Умеет выполнять стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства

2. Задачи освоения дисциплины

– Дать понимание принципиальных основ, практических возможностей и ограничений физико-химических методов исследования органических соединений разных классов.

– Ознакомить с аппаратным оснащением и условиями проведения эксперимента.

– Научить интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные, оптимальному выбору методов для решения поставленных задач и делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

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

Дисциплина относится к части образовательной программы, 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

Восьмой семестр, зачет с оценкой

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «неорганическая химия», «физическая химия», «органическая химия», «строение вещества», где приобретают необходимые профессиональные компетенции по атомно-молекулярной теории строения соединений, образования химических связей, их энергетики, а также принципам физико-химических (спектральных) методов исследования органических веществ.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

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

-лекции: 32 ч.

-лабораторные: 32 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 48 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Физико-химические методы исследования органических соединений.
Введение в курс ФХМИ.

Классификация методов анализа. Общая характеристика физико-химических методов исследований. Значение методов исследования для решения научных и практических задач. Химические и физические методы исследования. Классификация физико-химических методов: оптические, спектральные, электрохимические, хроматографические.

Обзор существующих физико-химических методов исследования состава, строения, структуры органических соединений: ИК-спектроскопия, хроматография, электронная микроскопия, термический анализ, ЯМР-спектроскопия, хромато-масс-спектрометрия. Физико-химические методы анализа: особенности, достоинства и недостатки.

Тема 2. Электронная спектроскопия.

Электромагнитное излучение. Электромагнитный спектр. Характеристики электромагнитного излучения. Постулаты Бора. Спектры атомов и молекул. Спектральные методы исследования. Единый подход к регистрации спектров веществ в различных частотных диапазонах. Спектральные приборы.

Происхождение спектров. Основные законы, параметры и метрологические характеристики спектрофотометрии. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.

Универсальность закона Бугера-Ламберта-Бера. Оптическая плотность, пропускание, их взаимосвязь. Физический смысл молярного коэффициента поглощения. Отклонения от основного закона светопоглощения. Закон аддитивности. Изображение спектров поглощения.

Общая схема спектрофотометра. Источники излучения. Монохроматоры. Кюветы.

Хромофоры и ауксохромы, влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в

электронных спектрах. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп.

Электронные спектры основных классов органических соединений. Правила Вудворда-Физера. Сравнительная характеристика электронных переходов.

Количественная УФ спектроскопия. Метод молярного коэффициента поглощения. Метод сравнения оптических плотностей. Метод градуировочного (калибровочного) графика. Метод уравнивания. Метод добавок.

Основные приемы фотометрического определения. Анализ однокомпонентных систем. Анализ многокомпонентных смесей. Исследование кислотно-основных равновесий. Исследование комплексных соединений.

Тема 3. Инфракрасная спектроскопия.

Особенности метода ИК-спектроскопии. История открытия, физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.

Принцип работы ИК спектрофотометра. ИК-спектроскопия с Фурье-преобразованием. Подготовка образцов и съемка спектров. НПВО-спектроскопия: техника эксперимента, свойства используемых материалов.

ИК-спектроскопия классов органических соединений: полосы поглощения основных функциональных групп, запрещенные и разрешенные переходы, взаимное влияние атомов в молекулах на спектры органических соединений.

Тема 4. Спектроскопия комбинационного рассеяния.

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Теоретические основы КР-спектроскопии: история открытия, принцип метода, правила отбора, колебательные спектры. Аппаратура для получения спектров КР. Интенсивность полос в спектрах КР. Сравнение ИК- и КР-спектроскопии. Задачи метода, его достоинства и недостатки.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения тестов по лекционному материалу, выполнения индивидуальных заданий, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет с оценкой в восьмом семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет состоит из двух частей. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Первая часть представляет собой тест из 10 вопросов, проверяющих РООПК-1.2. Ответы на вопросы первой части даются путем выбора из списка предложенных.

Вторая часть содержит 2 вопроса, для проверки РООПК-2.2 и РОПК 1.1. Вопросы, оформлены в виде практических задач. Ответы на вопросы второй части предполагают решение задач и краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень тестовых вопросов:

1. Какой из электронных переходов обладает наибольшей энергией?
 - а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$;
 - б) $\pi \rightarrow \pi^*$;
 - в) $n \rightarrow \pi^*$;
 - г) $\pi \rightarrow \sigma^*$.

2. Молярный коэффициент поглощения показывает:

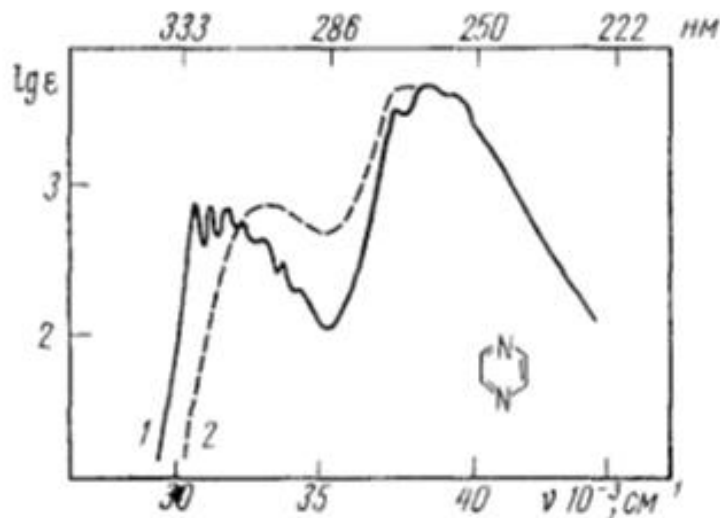
- а) оптическую плотность раствора, содержащего в 100 мл 1г вещества;
- б) угол поворота плоскости поляризации монохроматического света на путь длиной в 1 дм в среде, содержащей оптически активное вещество, при условном приведении концентрации этого вещества к значению равному 1 г/мл;
- в) сколько электромагнитного излучения поглотилось исследуемым раствором с концентрацией 1 моль/л и толщиной слоя 1 см

3. В качестве источника излучения в спектроскопии комбинационного рассеяния используют:

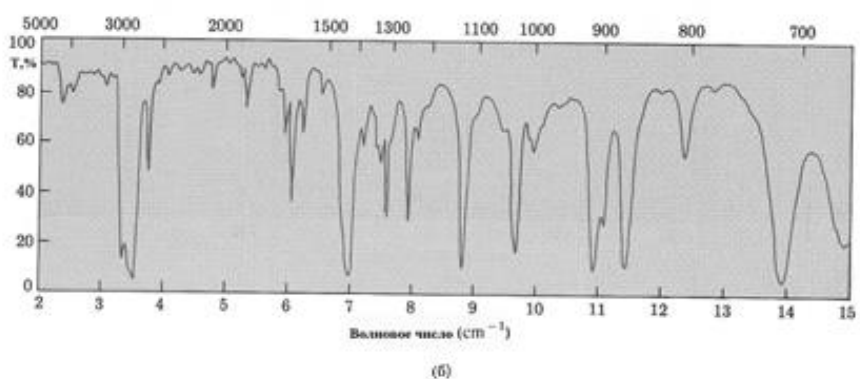
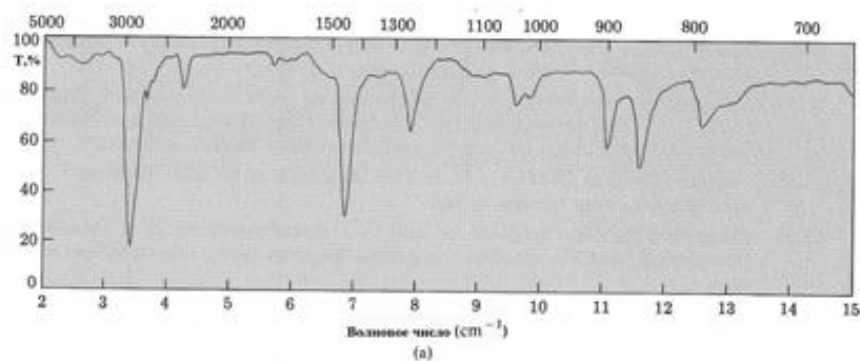
- а) лазер
- б) водородную лампу
- в) теплонагреватель

Примеры задач:

1. К какому типу переходов относятся полосы поглощения ацетофенона с максимумами при 240, 280 и 320 нм (в гексане), если известно, что $D_{240}=0,63$ ($l=0,5$ см; $C = 10^{-3}$ моль/л); $D_{280}=0,85$ ($l=1$ см; $C = 10^{-3}$ моль/л); $D_{320}= 0,42$ ($l=1$ см; $C= 10^{-2}$ моль/л).
2. Спектр пиразина изменяется при изменении полярности растворителя, как это показано на рисунке. Определите какой спектр соответствует раствору в воде и в циклогексане, и объясните происходящие изменения.



3. На рисунке приведены спектры циклогексана и циклогексена. Идентифицируйте их и поясните ваш ответ.



Результаты зачета с оценкой определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Вопрос 1. Оценка результатов тестирования выставляется по следующей схеме соответствий:

- 80-100% правильных ответов – «отлично»;
- 60-79% правильных ответов – «хорошо»;
- 40-59% правильных ответов – «удовлетворительно»;
- 0-39% правильных ответов – «неудовлетворительно».

Вопрос 2. Рассмотрены все составляющие вопроса – 5 баллов

Вопрос 3. Обоснованный ответ о предполагаемой структуре соединения, используя таблицы характеристических частот химических групп – 5 баллов.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23429>

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

- в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению лабораторных работ.
- д) Контрольные работы и тестовые задания к курсу.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Ким Л. Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн [и др.]. – М., Бином. Лаборатория знаний 2011. – 400 с.

– Купцов А. Х., Жижин Г. Н. Фурье-КР и Фурье-ИК спектры полимеров / А. Х. Купцов [и др.] – М. : Техносфера, 2013. – 696 с.

б) дополнительная литература:

- Казицина Л. А., Куплетская Н. В. Применение УФ-, ИК-, и ЯМР-спектроскопии в органической химии / Л. А. Казицина [и др.]. – М. : Изд-во МГУ, – 1979.
- Морозова Ю. П., Прялкин Б. С. Букварь по электронной спектроскопии. – Томск, 1998. – 39 с.
- Тарасевич Б. Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. – Москва. – 2012. – 52 с.
- Пентин Ю. А., Вилков Л. В.: Физические методы исследования в химии / Ю. А. Пентин – М. : Мир. – 2003. – 367 с.
- Прялкин Б. С. Лабораторный практикум по физико-химическим методам исследования органических соединений: [Учебно-методическое пособие. / Томск. гос. ун-т.] – Томск, – 2002. Вып 5+А. Молекулярная механика. – 26 с.
- Прялкин Б. С. Лабораторный практикум по физико-химическим методам исследования органических соединений: [Учебно-методическое пособие. / Томск. гос. ун-т.] – Томск, – 2005. Вып. 6.
- Садчикова Н. П., Арзамасцев А. П., Титова А. В. Современное состояние проблемы применения ИК-спектроскопии в фармацевтическом анализе лекарственных средств // Хим.-фарм.ж. 2008. - № 8. – С. 26-30.
- в) ресурсы сети Интернет:
 - Издательство «Лань» [Электронный ресурс]: электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб, 2010. URL: <http://e.lanbook.com/>
 - Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000. URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>
 - Научная библиотека Томского государственного университета [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 1997 – URL: <http://www.lib.tsu.ru/ru>
 - Google Scholar [Electronic resource] / Google Inc. – Electronic data. – [S. l. : s. n.]. – URL: <http://scholar.google.com/13>.
 - Общероссийская Сеть КонсультантПлюс Справочная правовая система. <http://www.consultant.ru>
 - ...

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.

Лаборатории для проведения практических занятий, оборудованные с использованием химической посуды и реактивов, УФ-спектрометр (Agilent Technologies), ИК-спектрометр (Agilent Technologies Cary 60 FTIR).

15. Информация о разработчиках

Фаустова Жанна Владимировна, кандидат химических наук, кафедра органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, старший преподаватель.