

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

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

Рабочая программа дисциплины

Физико-химические методы исследования

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Химия»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

– ОПК-2. Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием.

– ПК-1. Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

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. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик.

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

ИОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

ИПК-1.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.

ИПК-1.2. Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР

ИПК-1.3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.

ИПК-1.4. Готовит объекты исследования.

2. Задачи освоения дисциплины

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

– Ознакомить с аппаратурным 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 (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.

Дисциплина входит в Модуль Органическая химия

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

Семестр 8, 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 энергетике, а также принципам физико-химических (спектральных) методов исследования органических веществ. До изучения дисциплины «Физико-химические методы исследования органических соединений» студенты должны знать механизмы органических реакций, уметь определять реакционную способность органических соединений, видеть связь и различие между классами органических соединений, спектрального анализа для идентификации органических соединений.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

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

- лекции: 32ч.;
- семинарские занятия: 0 ч.
- практические занятия: 16 ч.;
- 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. Физико-химические методы исследования органических соединений. Введение в курс ФХМИ.

Обзор существующих физико-химических методов исследования состава, строения, структуры органических соединений: ИК-спектроскопия, хроматография, электронная микроскопия, термический анализ, ЯМР-спектроскопия, хромато-масс-спектрометрия.

Тема 2. Электронная спектроскопия. Спектры поглощения и испускания.

Понятие об УФ-спектроскопии: природа электронных спектров, электронные переходы, закон Бугера-Ламберта-Бера, схемы спектрофотометров, возможности их применения, достоинства и недостатки метода электронной спектроскопии.

УФ-спектроскопия классов органических соединений: хромоформная теория, правила отбора, спектры поглощения основных классов органических соединений.

Тема 3. Инфракрасная спектроскопия.

Особенности метода ИК-спектроскопии: история открытия, теоретические основы метода, основные типы колебаний и правила отбора, принцип метода и используемое оборудование. 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.

Теоретические основы КР-спектроскопии: история открытия, принцип метода, правила отбора, колебательные спектры. 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 контрольных работ, 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

Экзамен во втором семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть представляет собой тест из 10 вопросов, проверяющих ИОПК-1. Ответы на вопросы первой части даются путем выбора из списка предложенных.

Вторая часть содержит один вопрос, проверяющий ИОПК-2. Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме.

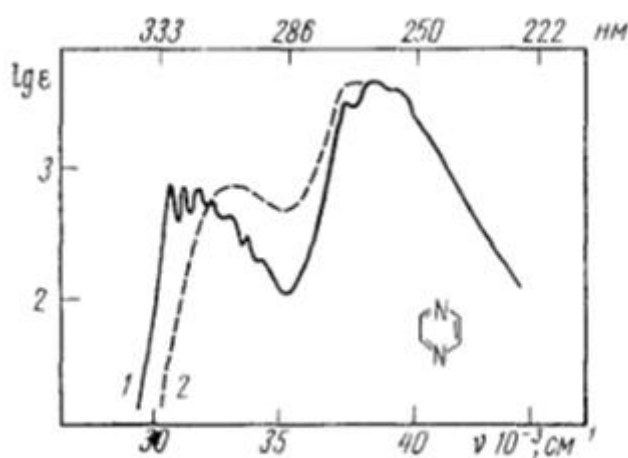
Третья часть содержит 1 вопрос, проверяющий ИПК-1, оформленный в виде практических задач. Ответы на вопросы третьей части предполагают решение задач и краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов

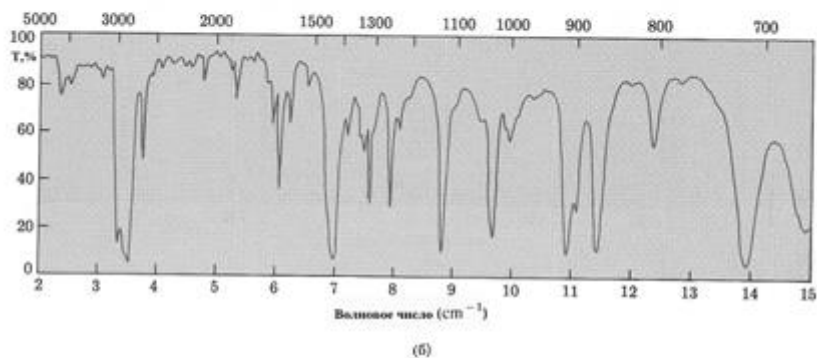
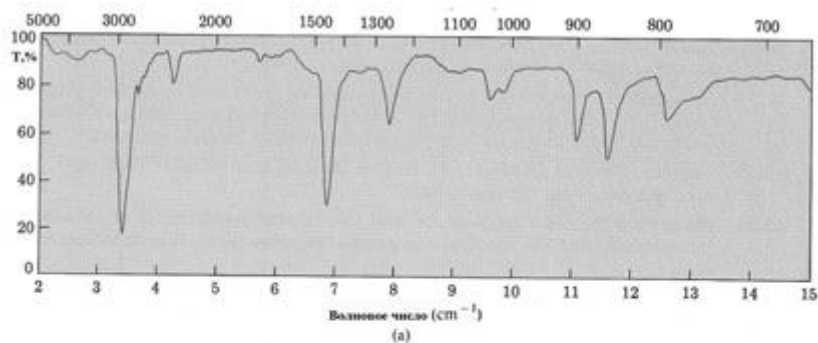
1. Правила отбора для электронных спектров.
2. Природа спектров КР. Антисктоковые полосы.
3. Основные узлы УФ-спектрометров и их назначение. Способы регистрации спектра

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 рис. 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 экзамена 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>.

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);
 - 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, канд. хим. наук, кафедра органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, ст. преподаватель.