

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
И.о. декана
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Избранные главы органической химии

по специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Химик / Химик-специалист. Преподаватель химии

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
В.В. Шелковников

Томск – 2024

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 наук;

ПК-5. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР;

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 2.1 Знает стандартные приемы и операции, используемые при получении веществ неорганической и органической природы

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 5.1 Умеет готовить детальные планы отдельных стадий прикладных НИР и НИОКР

РОПК 5.2 Умеет выбирать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР

РОПК 5.3 Умеет проводить испытания инновационной продукции

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

РОПК 6.2 Умеет составлять протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме

2. Задачи освоения дисциплины

Модуль 1. Масс-спектрометрия

– 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.

Модуль 2. Ресурсосберегающие технологии

– Освоить понятийный аппарат и теоретические основы о состоянии энергетической и сырьевой базы химической промышленности в России и мире.

– Научиться применять понятийный аппарат о состоянии энергетической и сырьевой базы химической промышленности в России и мире, расширить понимание современных направлений и тенденций развития международной концепции устойчивого развития, идеологии создания безотходных технологий,

- Освоить особенности применения основ системного подхода к организации безотходных, энергосберегающих экологизированных химических технологий.

Модуль 3. Ядерный магнитный резонанс

– Освоить основные понятия и закономерности ЯМР-спектрометрии

– Получить базовые навыки определения структуры органического соединения методом ЯМР.

3. Место дисциплины 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 Модуль Органическая химия.

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

Девятый семестр, зачет

Девятый семестр, экзамен

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, физика, строение вещества.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-лабораторные: 32 ч.

-практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 64 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Модуль 1. Масс-спектрометрия

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. Тандемная масс-спектрометрия МС/МС с использованием активации анализируемых веществ соударения.

Физические принципы активации ионов соударением или диссоциации, 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.

Модуль 2. Ресурсосберегающие технологии

Часть 1

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.

Часть 2

Тема 1. Классификация природных ресурсов. Понятие рационального природопользования. Проблемы рационального использования ресурсов России. Подготовка индивидуального задания

Тема 2. Классификация ресурсосберегающих технологий. Безотходные (каскадные), малоотходные, утилизация. Подготовка индивидуального задания

Тема 3. 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 4. Альтернативные ресурсосберегающие технологии. Применение частных случаев рационального использования ресурсов в химической промышленности, в частности в малотоннажных установках и в быту.

Модуль 3. Ядерный магнитный резонанс

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.

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 ЯМР¹³С.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по модулю «Масс-спектрометрия» проводится путем контроля посещаемости, обсуждения лекционного материала путём проведения устного опроса и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Текущий контроль по модулю «Ресурсосберегающие технологии» 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.

Текущий контроль по модулю «Ядерный магнитный резонанс» проводится путем посещаемости лекций, выполнения заданий к практическим занятиям и выполнения индивидуального задания. Фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

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 в девятом семестре по модулю 1. «Масс-спектрометрия» проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность зачета 1 час.

Зачет в девятом семестре по модулю 2. «Ресурсосберегающие технологии» проводится в устной форме с презентацией и ответами на вопросы аудитории. Продолжительность зачета 1 час.

Экзамен в девятом семестре по модулю 3. «Ядерный магнитный резонанс» проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

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 среде электронного обучения iDO - <https://lms.tsu.ru/enrol/index.php?id=22087>

- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению лабораторных работ.
- д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

Модуль 1. «Масс-спектрометрия»:

- 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 / Полякова А.А., Ревельский И.А., Токарев М.И.–М.: Химия, 1989. –240 с.;
 - Чепмен Дж. Практическая органическая масс-спектрометрия /Дж. Чепмен; Перевод с англ. А. Т. Лебедева, Чепмен Дж. Р. –М.: Мир, 1988. 216 с.

- в) ресурсы сети Интернет:
 - Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии / Лебедев А.Т. М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2003. 493с., <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 / Хмельницкий Р. А., Бродский Е. С., М.: Химия , 1984. 210 с. <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000138516/000138516.djvu>

Модуль 2. «Ресурсосберегающие технологии»:

- а) основная литература:
 - Белов С. В. Техногенные системы и экологический риск: Учебник для вузов / Белов С. В.. - 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 / Ларионов Н. М., Рябышенков А. С.. - 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: <https://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

Модуль 3. «Ядерный магнитный резонанс»:

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).

в) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. 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/Б1>.
2. 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:

1. Нифантьев И.Э., Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса. – М. : Методическая разработка МГУ, 2006. – 197 с.
2. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. – М. : Мир, 1984. – 478 с.
3. Воловенко 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.
4. Фримен Р. Магнитный резонанс в химии и медицине. – М. : Красанд, 2009. – 336 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 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.

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

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

15. Информация о разработчиках

Галанов Сергей Иванович, канд. хим. наук, доцент кафедры неорганической химии (модуль 2)

Дычко Константин Александрович, канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии (модуль 1)

Кравцова Светлана Степановна, канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии (модуль 3)

Сидорова Ольга Ивановна, канд. хим. наук, доцент кафедры физической химии (модуль 2)