

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

Физико-химические методы исследования

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.01.04.03

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

В.В. Хасанов

Томск – 2022

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

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 исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

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-6.1. Выполняет 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 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 «Физико-химические методы исследования» относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

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 энергетики, 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-1.1., ИОПК-1.2., ИОПК-1.3. Ответы на вопросы первой части даются путем выбора из списка предложенных.

Вторая часть содержит один вопрос, проверяющий ИОПК-2.1., ИОПК-2.2., ИОПК-2.3. Ответ на вопрос второй части дается в развернутой форме.

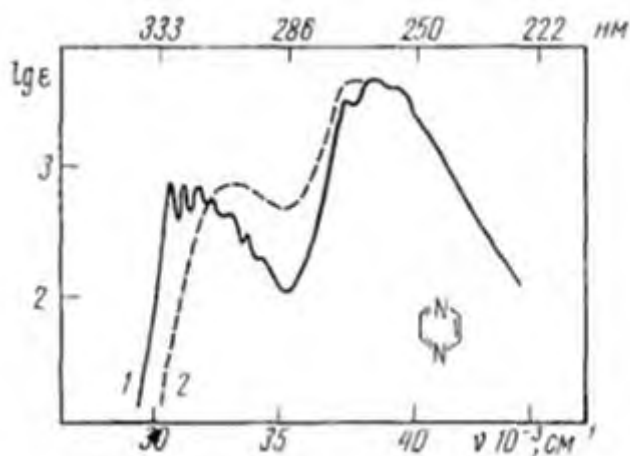
Третья часть содержит 1 вопрос, проверяющий ИПК-1.1, ИПК-1.2., ИПК-1.6., оформленный в виде практических задач. Ответы на вопросы третьей части предполагают решение задач и краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов

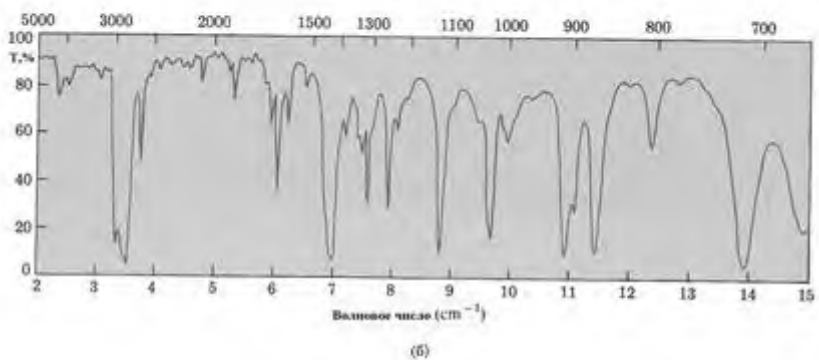
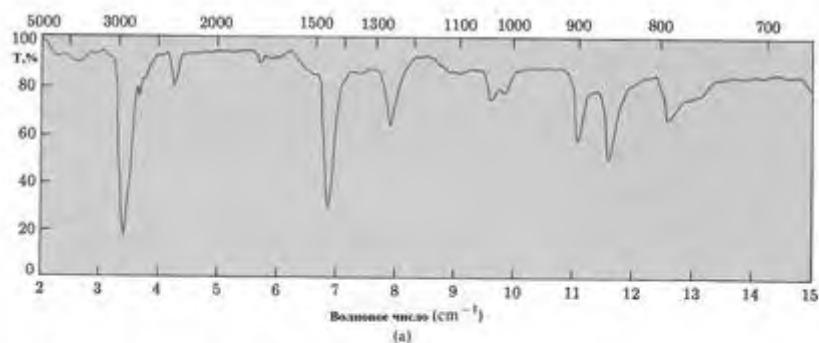
1. Правила отбора для электронных спектров.
2. Природа спектров КР. Антистоксовы полосы.
3. Основные узлы УФ-спектрометров и их назначение. Способы регистрации спектра

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 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

Пахнутова Евгения Андреевна, кандидат химических наук, кафедра органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.