

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ВШТЭ



Рабочая программа дисциплины

Б1.В.ДВ.04.02 Спектральные методы анализа органических соединений

Учебный план: ФГОСЗ++b180301.12-4 24-14.plx

Кафедра: 12 Органической химии

Направление подготовки:
(специальность) 18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки:
(специализация) Химическая технология органических веществ

Уровень образования: бакалавриат

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоё мкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Лаб. занятия				
7	УП	17	34	92,75	0,25	4	Зачет
	РПД	17	34	92,75	0,25	4	
Итого	УП	17	34	92,75	0,25	4	
	РПД	17	34	92,75	0,25	4	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, утверждённым приказом Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 922

Составитель (и):

Доктор химических наук, профессор

Анисимова Н.А.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой органической химии

Тришин Ю.Г.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Тришин Ю.Г.

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать у студентов прочные знания о важнейших современных физико-химических методах идентификации органических веществ и навыков их практического использования

1.2 Задачи дисциплины:

- Закрепление и расширение изучаемого материала в результате лабораторной и самостоятельной работы.
- Освоение студентами основной информации о применении физико-химических методов (ИК, УФ, ЯМР спектроскопия) для идентификации и количественного анализа органических веществ
- Формирование навыков практического использования физико-химических методов исследования для изучения структуры органических соединений.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Органическая химия

Общая и неорганическая химия

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ПК-5: Способен осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом, обосновывать принятие конкретного технического решения при разработке технологических процессов, выбирать технические средства и технологии с учетом экологических последствий их применения

Знать: технологические схемы производства важнейших органических соединений; основные направления практического использования органических соединений; основные источники научно-технической информации (электронные базы данных).

Уметь: использовать полученные знания в практической деятельности в качестве специалиста в области химии и технологии тонкого органического синтеза; пользоваться современными источниками научной информации

Владеть: навыками пользования учебной, справочной литературой и ресурсами Интернета по физико-химическим методам исследования; применением важнейших физико-химических методов исследования в научно-исследовательской и производственно-технологической деятельности.

3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Лаб. (часы)		
Раздел 1. Электронные спектры	7				О
Тема 1. Ультрафиолетовая спектроскопия. Условия получения УФ спектров. Диапазон лабораторного УФ спектрометра. Схема УФ спектра: единицы измерения, дальняя и ближняя УФ область, форма и интенсивность полосы поглощения. Подбор растворителя для снятия УФ спектра. Классификация электронных переходов: $\pi\text{-}\pi^*$, $n\text{-}\pi^*$, $n\text{-}\sigma^*$, $\sigma\text{-}\pi^*$. Энергия электронных переходов и интенсивность полос поглощения различных типов электронных переходов в УФ спектрах. Правило Мак-Коннела - идентификации полос связанных с $n\text{-}\pi^*$, $\pi\text{-}\pi^*$ переходами.		3		14,75	
Тема 2. УФ спектры основных классов органических соединений. Особенности возникновения УФ спектров алканов, алкенов, алкинов и их информативность. УФ спектры производных алканов, алкенов, алкинов. УФ-спектры алифатических и циклических диенов. Правило Вудворда-Физера. УФ-спектры карбонильных соединений. Особенности УФ-спектров поглощения ароматических углеводородов. Полоса бензольного поглощения. Условия bathochromного сдвига и интенсивности полос поглощения. Влияние природы и местоположения заместителя на положение полос бензольного поглощения. Лабораторная работа 1. Ультрафиолетовая спектроскопия. УФ спектры основных классов органических соединений.		3	10	17	
Тема 3. Инфракрасная спектроскопия. Диапазон ИК излучения и условия снятия ИК спектра. Подбор растворителя и условия съемки. Типы колебаний атомов в молекуле (валентные, деформационные). Ближняя, средняя и дальняя ИК области. Характеристика фундаментальной области поглощения ИК спектра. Диапазон «отпечатков пальцев» и области функциональных групп. Значение ближней, дальней ИК области и области высоких частот. Анализ и интерпретация ИК спектров.		2		18	

Тема 4. ИК спектры основных классов органических соединений Особенности ИК спектров алканов. Алкены и алкины. Полосы поглощения кратных связей C=C и C≡C. Максимум и интенсивность полос в зависимости от расположения в цепи и степени замещения кратных связей. Функционально замещенные органические соединения. Спирты. Полосы поглощения гидроксильной группы. Определение наличия и характера водородной связи. Карбонильные соединения. Полоса карбонильного поглощения в альдегидах, кетонах карбоновых кислотах. Характеристические частоты карбоновых кислот. Галогенпроизводные органических соединений. Влияние атома галогена на положение и интенсивность полос поглощения. Ароматические соединения. Интервалы полос поглощения ароматических соединений: VCH₃, □CH₃, колебания ароматического кольца. Влияние природы заместителей в бензольном кольце на характер полос поглощения. Лабораторная работа 2. Инфракрасная спектроскопия. ИК спектры основных классов органических соединений		3	10	14	
Раздел 2. Спектроскопия ЯМР ¹ H					
Тема 5. Природа ЯМР¹H спектроскопии Условия снятия спектра: подбор растворителя, и внешних условий (растворителя, концентрации раствора, температуры и pH-среды) на положение химического сдвига. Схема спектрометра ЯМР. Основные параметры ЯМР спектроскопии (δ и I). Химический сдвиг. Определение, значение, положение и единицы измерения химического сдвига. Эталонные соединения: TMS, ГМДС, CDCl₃, C₆D₆ и др. Сильное и слабое поле спектра. Схема спектра ЯМР¹H. Зависимость положения химического сдвига от экранирования протона, электроотрицательности заместителей, типа гибридизации атома. Экранирование протонов (анизотропные, парамагнитные, диамагнитные и кольцевые токи, «конус анизотропии»). Влияние анизотропии на сдвиг сигнала протонов в алкинах, аренах. Понятие об эквивалентных и неэквивалентных протонах. Влияние гибридизации атома на положение химического сдвига протонов при sp³, sp², sp-гибридизации. Влияние природы заместителей на положение сигнала в спектре ЯМР¹H (на примере молекул бензола, нитробензола и анилина). Мультиплетность сигнала. Синглет, дублет, триплет, квадруплет и мультиплет. Закономерность определения мультиплетности сигналов. Распределение интенсивности внутри мультиплета. Правило бинома. Определение значения (местоположения) мультиплета.	4		15		О

Тема 6. Константа спин-спинового взаимодействия (КССВ). Интегральная интенсивность. Информативность КССВ. Виды констант (ближняя, дальняя, геминальная, вицинальная). Зависимость КССВ от гибридизации атома углерода и электроотрицательности заместителей. Единицы измерения, диапазон и способы измерения КССВ. Интенсивность сигнала. Интегральная кривая. Лабораторная работа 3. Спектроскопия ЯМР1Н. Идентификация спектров ЯМР1Н представителей основных классов органических соединений		2	14	14	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		17	34	92,75	
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25			
Всего контактная работа и СР по дисциплине		51,25		92,75	

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ОПИСАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ, КРИТЕРИЕВ, СИСТЕМЫ И СРЕДСТВ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

5.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения
ПК-5	1. Может использовать знания о строении вещества и природе химической связи для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, физико-химических методов исследования для установления строения органических соединений. 2. Идентифицирует спектры ИК, УФ, ЯМР 1Н. 3. Способен понимать и использовать технологические схемы производства важнейших органических соединений, физико-химические методы исследования органических соединений для оценки основных параметров сырья и продукции.

5.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает достаточный уровень знаний по применению физико-химических методов исследования для идентификации органических соединений, свободно ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях; усвоил основную и знаком с дополнительной литературой; может свободно пользоваться картинками ИК, УФ, ЯМР1Н спектров, знает изученные закономерности проявления классов органических соединений.	Умение идентификации реальных спектров органических соединений в виде задачи или предоставленных спектров (спектральных параметров)
Не зачтено	Обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины; не может описать спектральные методы анализа; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя.	Обучающийся не может идентифицировать класс органических соединений по спектральным параметрам.

5.3 Типовые контрольные задания и/или иные материалы, используемые для оценки результатов обучения

5.3.1 Типовые контрольные вопросы

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 7	
1	Значение физико-химических методов исследования в установлении структуры органического соединения?
2	Шкала электромагнитного излучения: диапазон ИК, УФ, ЯМР спектроскопии.
3	Электронные спектры поглощения.
4	УФ спектроскопия. УФ и видимая часть спектра.
5	Тория цветности Витта. Окраска органических соединений.
6	Хромофоры и ауксохромы.
7	Классификация электронных переходов: $\pi\text{-}\pi^*$, $n\text{-}\pi^*$, $n\text{-}\sigma^*$, $\sigma\text{-}\sigma^*$. Энергия и интенсивность полос поглощения различных типов электронных переходов в УФ спектрах
8	Батохромный и гипсохромный сдвиги. Причины их обуславливающие.
9	Идентификация полос поглощения, связанных с $\pi\text{-}\pi^*$, $n\text{-}\pi^*$ переходами. Правило Мак-Коннела.
10	УФ спектры основных классов органических соединений.
11	Органические красители и индикаторы. Причина изменения окраски индикаторов.
12	Характеристика строения органических соединений с использованием ИК спектроскопии.
13	Типы колебаний атомов в молекуле (валентные, деформационные).
14	Основные параметры полос поглощения: ширина (интервал), максимум поглощения, интенсивность, расщепление, длина волны.
15	Диапазон ИК излучения: ближняя, средняя и дальняя ИК области.
16	Понятие об интервале «отпечатков пальцев» и области функциональных групп (характеристических полос)
17	Основные параметры ИК спектров алканов. Валентные и деформационные колебания -CH- , $\text{-CH}_2\text{-}$, -CH_3 групп.
18	Основные параметры ИК спектров непредельных соединений (алкенов, диенов, алкинов).
19	Спирты. Колебания связей -OH и C-O . Определение и характер водородной связи в растворах спиртов. Проявление в ИК спектре свободной и связанной OH группы.
20	ИК спектры карбонильных соединений. Проявление полосы $\nu\text{C=O}$ в альдегидах, кетонах карбоновых кислотах.
21	ИК спектры аминов. Характерные признаки ИК спектров первичных, вторичных и третичных аминов.
22	Основные параметры спектроскопии ЯМР: химический сдвиг и константа спин-спинового взаимодействия.
23	Факторы, влияющие на положение химического сдвига (экранирование, электроотрицательность заместителя, гибридизация атома углерода, магнитного поля, пространственного взаимодействия атомов).
24	Влияние гибридизации атома на положение химического сдвига протонов при sp^3 , sp^2 , sp -гибридизации.
25	Влияние природы заместителя на положение сигнала в спектре ЯМР ^1H (на примере молекул бензола, нитробензола и анилина).
26	Мультиплетность сигнала (сиглет, дублет, триплет, квадруплет и мультиплет). Правило бинома.
27	Константа спин-спинового взаимодействия (КССВ): единицы измерения, диапазон и способы измерения КССВ.

5.3.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено

5.3.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Задание 1.

Произведите соотнесение химических сдвигов протонов метильных групп (0.0, 2.0, 0.75, 4.2 м.д.) с формулами предложенных соединений (этан, толуол, триметила-мин, диметиловый эфир, ТМС). Ответ поясните.

Задание 2.

Произведите соотнесение значений химических сдвигов (1.0, 2.15, 3.0, 3.4 м.д.) с формулами предложенных соединений (хлорметил, метиламин, этан, метанол). Ответ поясните.

5.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения

5.4.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

5.4.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная ☒ Письменная ☒ Компьютерное тестирование ☐ Иная ☐

5.4.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Время на подготовку ответа по билету 25 минут.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Павлов, А. И.	Физико-химические методы анализа	Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ	2014	http://www.iprbookshop.ru/30016.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Гришаева, О. В.	Спектральная идентификация органических соединений	Кемерово: Кемеровская государственная медицинская академия	2010	http://www.iprbookshop.ru/6090.html
Зайцев, Б. Е., Ковальчукова, О. В., Страшнова, С. Б.	Применение ИК-спектроскопии в химии	Москва: Российский университет дружбы народов	2008	http://www.iprbookshop.ru/11418.html
Венер, М. В.	Строение молекул и основы квантовой химии	Москва: Московский городской педагогический университет	2010	http://www.iprbookshop.ru/26626.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL: <http://window.edu.ru/>

Портал фундаментального химического образования России [Электронный ресурс]. URL: <http://www.chemnet.ru>

Химическая информационная сеть [Электронный ресурс]. URL: <http://www.chemnavigator.com>

Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/>

Электронная библиотека ВШТЭ СПб ГУПТД [Электронный ресурс]. URL: <http://nizrp.narod.ru>

Электронно-библиотечная система «Айбукс» [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ibooks.ru/>

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftWindows 8

MicrosoftOfficeProfessional 2013

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска

Б-339	Рефрактометры, весы лабораторные, приборы для определения температуры плавления , сушильный шкаф, плитки электрические, мешалки магнитные, мешалки механические, вакуумный насос, водоструйные насосы, вытяжные шкафы, испаритель роторный LABOROTA-4000, спектрофотометр СФ-2000.
-------	--