

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ С.А. ЕСЕНИНА»

Утверждаю:
декан естественно-
географического факультета



С.В. Жеглов
«30» августа 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Методы исследования строения органических соединений

Уровень основной профессиональной образовательной программы
магистратура

Направление подготовки 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) Органическая химия

Форма обучения очная

Сроки освоения ОПОП Нормативный, 2 года

Факультет (институт) естественно-географический

Кафедра химии

Рязань, 2019

ВВОДНАЯ ЧАСТЬ

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины Методы исследования строения органических соединений являются: формирование знаний и умений в области физико-химических методов исследования органических соединений; освоение методики установления структуры и состава органических соединений; изучение современных инструментальных методов анализа.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВУЗА

2.1. Дисциплина Методы исследования строения органических соединений относится к части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1.

2.2. Для изучения данной дисциплины необходимы следующие предшествующие дисциплины: Аналитическая химия и Физико-химические методы исследований уровня образования бакалавриат или специалитет.

2.3. Перечень последующих дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной дисциплиной: служит информационной и методологической основой при изучении специальных дисциплин и подготовке магистерской диссертации.

2.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

Изучение данной дисциплины направлено на формирование у обучающихся общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

№ п/п	Код и содержание компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть (навыками)
1	2	3	4	5	6
1.	ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.2. Использует современное оборудование, и программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук	Основы методов ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии; хроматографии.	проводить обработку результатов исследования	представлением о принципиальных возможностях физических методов в решении химических проблем вне зависимости от их практических возможностей.
2.	ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных и экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	соответствие теоретических аспектов методов физико-химического анализа с целью и задачами исследования объектов.	проводить обработку хроматограмм	навыками самостоятельной работы на оборудовании для проведения физико-химического анализа

3.	<p>ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>ПК-1.2 Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными</p>	<p>порядок систематизации информации, полученной в ходе НИР и НИОКР.</p>	<p>систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР</p>	<p>сопоставления полученных данных с литературными данными</p>
----	--	---	--	--	--

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

1. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		3	№	№	№
		часов	Часов	часов	часов
1	2	3	4	5	6
1. Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	90	90		-	-
В том числе:					
Лекции (Л)	10	10			
Практические занятия (ПЗ), Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	30	30			
Иные виды занятий					
2. Самостоятельная работа студента (всего)	104	104			
3. Курсовая работа (при наличии)	КП				
	КР				
Вид промежуточной аттестации	зачет (З),	Э	Э		
	экзамен (Э)	36	36		
ИТОГО: общая трудоемкость	часов	180	180		
	зач. ед.	5	5		

2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

2.1. Содержание разделов дисциплины (модуля)

№ семестра	№ раздела	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Содержание раздела в дидактических единицах
1	2	3	4

3	1.	Масс-спектрометрия	<p>Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, "четно-электронное", затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом: простой разрыв связей (α-разрыв, бензильный и аллильный разрывы), ретро-реакция Дильса-Альдера, перегруппировка Мак-Лафферти, скелетные перегруппировки, ониевые реакции. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения</p>
	2.	Электронная спектроскопия	<p>Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-Физера. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.</p>
	3.	ИК спектроскопия	<p>Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C-C, C=C, C\equivC, C-аром- C-аром, Csp³-H, Csp²-H, Csp-H, C-O, C-N, O-H, N-H, S-H, C=O, CHO, COOH, COOR, CONaI, NO₂, C\equivN. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 см⁻¹).</p>

4.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	<p>Физические основы метода: Поведение ядер в статическом магнитном поле: квантование по направлению. Ларморова частота, ядерные зеемановские уровни, их населённости, макроскопическое намагничивание, условие резонанса. Основные принципы эксперимента ЯМР. СВ - спектрометр, полевой и частотный «свипы». Импульсный метод ЯМР, характеристики импульсов. Классическое описание импульсного эксперимента. Уравнение угла поворота вектора намагниченности, его экспериментальное подтверждение. Поперечная намагниченность и фазовая когерентность. Релаксация, времена спин-решёточной и спин-спиновой релаксации. Фурье-преобразование, накопление спектра. Импульсный спектрометр. магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом $I=1/2$: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A_2, A_X, AB и A_2B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия $JH - H$. Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия $JC - H$, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерные (2D) эксперименты ЯМР. Гетероядерная 2D-j, δ-спектроскопия ЯМР ^{13}C и гомоядерная 2D-j, δ-спектроскопия ЯМР 1H. Ядерный эффект Оверхаузера (ЯЭО). Особенности гомо- и гетероядерных систем. Факторы увеличения интенсивностей сигналов. Применения ЯЭО для изучения строения и корректного отнесения сигналов. Экспериментальные аспекты ЯЭО. Химически индуцируемая динамическая поляризация ядер (ХИДПЯ). Особенности применения ХИДПЯ для изучения механизма гомогенного гидрирования алкенов и алкинов. Динамическая спектроскопия ЯМР. Изучение обратимых реакций первого порядка и межмолекулярных реакций обмена. Вращение вокруг простых связей C-C и «частично двойных» связей, инверсии у атомов азота и фосфора, инверсия циклов, валентная таутомерия, кето-енольная таутомерия, межмолекулярный протонный обмен. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C</p>
5.	Хроматографические методы анализа	<p>Введение. Классификация методов. Адсорбционная жидкостная колоночная хроматография. Плоскослойная хроматография (ТСХ, БХ). Ионообменная хроматография. Гель-хроматография. Газовая хроматография. Высокоэффективная жижкостная хроматография.</p>

2.2. Перечень лабораторных работ (при наличии), примерная тематика

курсовых работ (при наличии)

Лабораторная работа № 1. Приготовление хроматографической колонки, определение ее характеристик.

Цель работы: получение навыков работы с хроматографическим оборудованием.

Лабораторная работа № 2. Определение параметров удерживания нормальных алканов.

Цель работы: изучение методики качественного хроматографического анализа.

Оборудование: газовый хроматограф с принадлежностями, смесь нормальных алканов. Лабораторная работа № 3. Определение качественного состава смеси замещенных фенолов методом ТСХ.

Цель работы: изучение методики качественного анализа смеси замещенных фенолов. Оборудование: пластины для ТСХ, смесь алкилфенолов, набор органических растворителей, устройство для проведения разгонки фенолов восходящим методом, УФ- лампа (для регистрации пятен алкилфенолов).

Лабораторная работа № 4. Метод ВЭЖХ-определения содержания кофеина в лекарственных средствах. Цель работы: освоение методики хроматографического анализа лекарственных образцов, содержащих кофеин. Оборудование: жидкостной хроматограф, образцы лекарственных образцов для анализа.

3. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТА

Самостоятельная работа осуществляется в объеме 104 часов. Видами СРС является подготовка к защите лабораторной работы.

4. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ (см. Фонд оценочных средств)

4.1. Рейтинговая система оценки знаний обучающихся по дисциплине (модулю) *(при необходимости)*.

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

5.1. Основная литература

№ п/п	Автор (ы), наименование, место издания и издательство, год
1	2
1.	Сычев, С.Н. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем [Электронный ресурс] : учеб. пособие / С.Н. Сычев, В.А. Гаврилина. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2013. — 256 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/5108 . — Загл. с экрана.
2.	Практикум по органической химии [Текст] : учебное пособие / под ред. Н. С. Зефирова. - М. :

	БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 568 с. : ил. - (Учебник для высшей школы). - Доп. УМО.
3.	Никитина, Н. Г. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Г. Никитина, А. Г. Борисов, Т. И. Хаханина ; под ред. Н. Г. Никитиной. — 4-е изд., перераб. и доп. — М. : Издательство Юрайт, 2017. — 394 с. — (Серия : Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-00427-4. — Режим доступа : www.biblio-online.ru/book/535AD001-D1FA-47A8-B1EA-FBC6627EAF21 .

5.2. Дополнительная литература

№ п/п	Автор (ы), наименование, место издания и издательство, год
1	2
1	Конюхов, В.Ю. Хроматография [Электронный ресурс] : учеб. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2012. — 224 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4044 . — Загл. с экрана.
2	Долгоносков, А.М. Колоночная аналитическая хроматография: практика, теория, моделирование [Электронный ресурс] : учеб. пособие / А.М. Долгоносков, О.Б. Рудаков, А.Г. Прудковский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2015. — 468 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/63592 . — Загл. с экрана.
3	Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.И. Васильева [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 416 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168 . — Загл. с экрана.
4	Александрова, Э. А. Аналитическая химия в 2 книгах. Книга 2. Физико-химические методы анализа : учебник и практикум для прикладного бакалавриата / Э. А. Александрова, Н. Г. Гайдукова. — 2-е изд., испр. и доп. — М. : Издательство Юрайт, 2017. — 355 с. — (Серия : Бакалавр. Прикладной курс). — ISBN 978-5-534-03612-1. — Режим доступа : www.biblio-online.ru/book/BD48501F-8E90-4AA4-B957-91554FA1D0D1 .

5.3. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : научная электронная библиотека. — Доступ зарегистрированным пользователям по паролю. — Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 20.01.2020).
2. Лань [Электронный ресурс] : электронная библиотека. — Доступ к полным текстам по паролю. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 20.01.2020).
3. Научная библиотека РГУ имени С. А. Есенина [Электронный ресурс] : сайт. — Режим доступа: <http://library.rsu.edu.ru>, свободный (дата обращения: 20.01.2020).
4. Юрайт [Электронный ресурс] : электронная библиотека. — Доступ к полным текстам по паролю. — Режим доступа: <https://www.biblio-online.ru> (дата обращения: 20.01.2020).

5.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее – сеть «Интернет»), необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. ChemNet. Россия [Электронный ресурс] : химическая информационная сеть. — Режим доступа: www.chemnet.ru, свободный (дата обращения: 20.01.2020).
2. ChemPort.Ru [Электронный ресурс] : портал. — Режим доступа: www.chemport.ru, свободный (дата обращения: 20.01.2020)
3. ABC Chemistry [Электронный ресурс] : бесплатный полнотекстовый каталог журналов по химии. — Режим доступа: <http://abc-chemistry.org/index.html>, свободный (дата обращения: 20.01.2020).
4. ChemSpider [Электронный ресурс] : база данных химических соединений и

смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании. – Режим доступа: <http://www.chemspider.com/>, свободный (дата обращения: 20.01.2020).

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Стандартно оборудованные аудитории для проведения интерактивных лекций и практических занятий: видеопроектор, экран настенный, др. оборудование. Специализированные химические лаборатории, оборудованные наборами необходимых реактивов и химической посудой.

7. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекция	Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии. Уделить внимание следующим понятиям (перечисление понятий) и др.
Практические занятия	Проработка рабочей программы дисциплины, уделяя особое внимание целям и задачам, структуре и содержанию дисциплины. Конспектирование источников. Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы, работа с текстом (указать текст из источника и др.), прослушивание аудио- и видеозаписей по заданной теме, решение расчетно-графических заданий, решений задач по алгоритму и др.
Коллоквиум	Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам и др.
Подготовка к экзамену	При подготовке к экзамену (зачету) необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу и др.

8. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММНОМУ ОБЕСПЕЧЕНИЮ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА:

Название ПО	№ лицензии
MS Office 2007 russian acdmc open	45472941
MS Windows Professional Russian	47628906

LibreOffice	свободно распространяемая
7-zip	свободно распространяемая
FastStoneImageViewer	свободно распространяемая
FoxitReader	свободно распространяемая
doPdf	свободно распространяемая
VLC media player	свободно распространяемая
ImageBurn	свободно распространяемая
DjVu Browser Plug-in	свободно распространяемая

9. ИНЫЕ СВЕДЕНИЯ