

Министерство образования и науки РФ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Самарский государственный университет»
Химический факультет



«Утверждаю»

Проректор по научной работе

А.Ф. Крутов
09.09

А.Ф. Крутов
2011 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Физико-химические методы исследования органических соединений»

ОД.А.03; цикл ОД.А.00 «Специальные дисциплины отрасли науки и научной специальности»
основной образовательной программы подготовки аспиранта
по отрасли 02.00.00 – Химические науки,
специальность 02.00.03 – Органическая химия

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.03 – Органическая химия, в соответствии с Программой-минимумом кандидатского экзамена по специальности 02.00.03 «Органическая химия» по химическим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ № 274 от 08.10.2007 г., и учебным планом СамГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составитель рабочей программы: *Зайцев Валерий Петрович, доцент, кандидат химических наук*

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета протокол № 1 от 08. 09. 2011 г.

Декан химического факультета

08. 09. 2011 г.



С.В. Курбатова

1. Цели и задачи дисциплины, ее место в системе подготовки аспиранта, требования к уровню освоения содержания дисциплины

1.1. Цели и задачи изучения дисциплины

Цель дисциплины - изучение основ теории и практики основных современных физико-химических методов установления структуры органических соединений.

Задачи дисциплины:

- 1) сформировать базовые знания и умения в области методов исследования строения органических соединений для подготовки к научно-исследовательской работе;
- 2) раскрыть роль физико-химических методов исследования в работе химика органика;
- 3) рассмотреть основные экспериментальные закономерности физико-химических методов исследования и установления структуры органических соединений;
- 4) обеспечить овладение методологией применения физико-химических методов исследований органических соединений.

1.2. Требования к уровню подготовки аспиранта, завершившего изучение данной дисциплины

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

- **иметь представление:** о принципиальных возможностях физических методов в решении химических проблем вне зависимости от их практических возможностей;
- **знать:**
 - основы методов ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса (на ядрах ^1H и ^{13}C) и масс-спектрометрии.
 - – о возможностях физических методов в решении химических проблем вне зависимости от их практических возможностей;
- **уметь:**
 - проводить структурный анализ органических соединений по данным УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрометрии.

1.3.Связь с предшествующими дисциплинами

Курс предполагает наличие у аспирантов знаний по основам неорганической и органической химии, физической химии, квантовой химии, теории строения вещества, методы органического синтеза, химию природных соединений и теорию реакционной способности органических соединений в объеме программы высшего профессионального образования.

1.4.Связь с последующими дисциплинами

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке и написании диссертации по специальности 02.00.03 – Органическая химия.

2. Содержание дисциплины

2.1. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах и зачетных единицах)

Форма обучения (вид отчетности)

1 год аспирантуры; вид отчетности – зачет.

Вид учебной работы	Объем часов / зачетных единиц
Трудоемкость изучения дисциплины	36 / 1
Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)	4
в том числе:	
лекции	2

практические занятия	2
лабораторные занятия	-
Самостоятельная работа аспиранта (всего)	32
в том числе:	
Подготовка к практическим занятиям	4
Подготовка реферата	0
Подготовка эссе	0
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	28

2.2. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц			
		лекции	лабораторные работы	практические занятия	самостоят. работа
1	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	2	0	2	2
2	Масс-спектрометрия	0	0	0	6
3	Электронная УФ спектроскопия	0	0	0	4
4	Колебательная ИК спектроскопия	0	0	0	8
5	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	0	0	0	8
	<i>Итого:</i>	2	0	2	28

2.3. Лекционный курс.

ВВЕДЕНИЕ. Общая характеристика спектроскопических методов исследования

Возникновение и развитие физических методов исследования строения органических соединений. Спектроскопические методы. Комплексное использование спектроскопических методов в целях идентификации веществ и установления их химического строения.

РАЗДЕЛ 1. Масс-спектрометрия

Тема 1.1. Общая характеристика спектроскопических методов исследования.

Физические основы метода

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.

Тема 1.2. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений

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.

Тема 1.3. Установление строения органических соединений

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.

РАЗДЕЛ 2. Электронная УФ спектроскопия

Тема 2.1. Физические основы метода

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.

Тема 2.2. Поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп

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.

РАЗДЕЛ 3. Колебательная ИК спектроскопия

Тема 3.1. Физические основы метода

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.

Тема 3.2. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений

Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C \equiv C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, CONaI, NO₂, C \equiv N. 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).

РАЗДЕЛ 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Тема 4.1. Физические основы метода

Физические основы метода: 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.

Тема 4.2. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса

Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом $I=1/2$: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A_2 , AX , 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.

Тема 4.3. Спектроскопия протонного магнитного резонанса

Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H} . Двойной резонанс.

Тема 4.4. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса

Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-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). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C .

2.4. Практические занятия – «Общая характеристика спектроскопических методов исследования» (спектроскопические методы; комплексное использование спектроскопических методов в целях идентификации веществ и установления их химического строения) (2 часа).

3. Организация текущего и промежуточного контроля знаний

3.1. Контрольные работы – не предусмотрены.

3.2. Список вопросов для промежуточного тестирования – не предусмотрено.

3.3. Самостоятельная работа

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- масс-спектрометрия;
- электронная УФ спектроскопия;
- колебательная ИК спектроскопия;
- спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

3.3.1. Поддержка самостоятельной работы:

- Список литературы и источников для обязательного прочтения.
- Полнотекстовые базы данных и ресурсы, доступ к которым обеспечен из кампусной сети СамГУ (сайт научной библиотеки СамГУ, URL: <http://weblib.samsu.ru/level23.html>):

1. Издания Самарского государственного университета
2. Полнотекстовая БД диссертаций РГБ
3. БД реферативного журнала «Химия»

4. Научная электронная библиотека РФФИ (e-Library)
5. БД издательства ELSEVIER
6. Oxford University Press
7. Университетская библиотека ONLINE
8. Университетская информационная система России

3.3.2. Тематика рефератов – не предусмотрены.

Итоговый контроль проводится в виде зачета.

4. Технические средства обучения и контроля, использование ЭВМ (*Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов*).

Программные пакеты: Microsoft Office; OpenOffice; Accelrys Discovery Studio Client, PASS Inet, ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; PC GAMESS, OpenBabel; Jmol; MacMolPlt онлайн-сервисы сайта <http://www.nmrdb.org/>

Сайт «Дистанционные образовательные технологии» Самарского государственного университета (Химический факультет) – URL: <http://dls.ssu.samara.ru/moodle/course/>

Сайт научной библиотеки СамГУ, с доступом к электронному каталогу и полнотекстовым базам данных – URL: <http://weblib.samsu.ru/level23.html>

5. Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты)
не предусмотрены.

6. Материальное обеспечение дисциплины (*Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов*)

Компьютерные классы, оснащенные компьютерами класса Pentium 4 с выходом в Интернет и в локальную сеть Самарского государственного университета, а также принтеры, сканеры и ксероксы.

7. Литература

7.1. Основная

1. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии / А.Т. Лебедев. – М.: БИНОМ. Лабораторий знаний, 2003. – 493 с.
2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии: Учебник. М.: Мир, 2003.
3. Breitmaier E. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. John Wiley & Sons, LTD, 2002.

7.2. Дополнительная

1. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических молекул. М.: Высшая школа, 1984.
2. Сильверстейн Р., Басслер Г., Моррил Т. Спектроскопическая идентификация органических соединений. М.: Мир, 1977.
3. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа, 1971.
4. Бранд Дж., Эглинтон Г. Применение спектроскопии в органической химии. М.: Мир, 1967.
5. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М.: Мир, 1992.
6. Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы: Учебник для вузов - М.: Высшая школа, 1989 – 287 с.
7. Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия: Учебник для хим. спец. вузов - М.: Высшая школа, 1987 - 367с.

7.3. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины для организации самостоятельной работы аспирантов

Гарькин В.П. Физико-химические методы исследования органических соединений. Лабораторный практикум. Куйбышев, 1987.

Учебно-методические материалы на сайте кафедры органической, биоорганической и медицинской химии http://chemfac.samsu.ru/KOChem/ucheb_pos.htm

- Задачи и упражнения (Дерябина Г.И., 2008-2010)

<http://chemfac.samsu.ru/KOChem/Zadachi.htm>

- Константы заместителей (к теме "Корреляционный анализ органических реакций")

<http://chemfac.samsu.ru/KOChem/Zadachi.htm>

- Справочник химика, III том

http://chemfac.samsu.ru/KOChem/OX_doc/nikolskij_02_03.djvu

Прикладные программы:

- ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; OpenBabel; Jmol для визуализации и квантовохимических расчетов;

- Моделирование атомных и молекулярных орбиталей (СамГУ);

- *МОХ* (СамГУ) для построения молекулярных диаграмм, расчета энергий локализованных молекулярных орбиталей.