

Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

**ДИСЦИПЛИНЫ**

*«Б.1.В.ОД.6 Спектральный анализ»*

Уровень высшего образования

**БАКАЛАВРИАТ**

Направление подготовки

*04.03.01 Химия*

(код и наименование направления подготовки)

*Нефтехимия*

(наименование направленности (профиля) образовательной программы)

Тип образовательной программы

*Программа академического бакалавриата*

Квалификация

*Бакалавр*

Форма обучения

*Очная*

Год набора 2018

Рабочая программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии

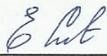
наименование кафедры

протокол № 5 от "10" 01 2018г.

Заведующий кафедрой

Кафедра химии

наименование кафедры



подпись

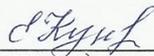
Е.В. Сальникова

расшифровка подписи

Исполнители:

доцент

должность



подпись

Е.А. Кунавина

расшифровка подписи

должность

подпись

расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО:

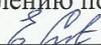
Председатель методической комиссии по направлению подготовки

04.03.01 Химия

код наименование

личная подпись

расшифровка подписи



Е.В. Сальникова

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки

личная подпись

Н.Н. Грицай

расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета

личная подпись

Е.С. Барышева

расшифровка подписи

№ регистрации \_\_\_\_\_

© Кунавина Е.А., 2018  
© ОГУ, 2018

## Цель и задачи освоения дисциплины

**Цель** освоения дисциплины – обеспечить полное усвоение теоретических и практических основ спектральных методов анализа.

**Задачи:** изучить основные физико-химические методы установления структуры органических соединений, включая масс-спектрометрию, электронную и колебательную спектроскопию, спектроскопию ядерного магнитного резонанса; сформировать умение расширять круг знаний на основе материала, приобретенного на аудиторных занятиях; сформировать навыки расшифровки масс-спектров, ИК- и УФ-спектров, спектров ЯМР <sup>1</sup>H и ЯМР <sup>13</sup>C; научить устанавливать строение соединений на основе использования комплекса спектральных данных.

## 2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам (модулям) вариативной части блока 1 «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б.1.Б.11 Физика, Б.1.Б.13 Аналитическая химия, Б.1.В.ОД.8 Химическая технология*

Постреквизиты дисциплины: *Б.1.В.ОД.2 Токсикологическая химия, Б.1.В.ОД.4 Нефтехимический синтез*

## 3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
<p><b>Знать:</b> методы получения, идентификации и исследования свойств веществ (материалов); стандартные методы обработки результатов эксперимента</p> <p><b>Уметь:</b> проводить многостадийный синтез; выбирать методы диагностики веществ и материалов, проводить стандартные измерения; обрабатывать результаты эксперимента</p> <p><b>Владеть:</b> навыками проведения эксперимента и методами обработки его результатов</p>	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
<p><b>Знать:</b> основные области использования современной аппаратуры при проведении научных исследований; принцип работы современной аппаратуры при проведении научных исследований</p> <p><b>Уметь:</b> работать на современной аппаратуре по стандартным методикам анализа; уметь адаптировать стандартные методики для проведения научных исследований; проводить наблюдения и измерения, составлять их описание, формулировать выводы и интерпретировать результаты</p> <p><b>Владеть:</b> базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований; навыками составления описаний научных исследований и формулировкой выводов.</p>	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований
<p><b>Знать:</b> современные методы теоретического и экспериментального</p>	ПК-4 способностью применять основные

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
<p>исследования; стандартные законы и методы естественнонаучных дисциплин часто используемые для обработки результатов эксперимента в области профессиональной деятельности; источники научной информации по теме исследования</p> <p><b>Уметь:</b> использовать и понимать знания прикладных и фундаментальных разделов специальных дисциплин химии для научно-исследовательской деятельности; ориентироваться на прикладной (практико-ориентированный) вид профессиональной деятельности; анализировать специальную научную литературу с целью составления плана исследования и выбора метода исследования</p> <p><b>Владеть:</b> теорией и практикой современных методов исследования базируясь на законах и закономерностях развития химической науки</p>	естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов

## 4 Структура и содержание дисциплины

### 4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 академических часов).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	5 семестр	всего
<b>Общая трудоёмкость</b>	<b>144</b>	<b>144</b>
<b>Контактная работа:</b>	<b>34,25</b>	<b>34,25</b>
Лекции (Л)	18	18
Лабораторные работы (ЛР)	16	16
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
<b>Самостоятельная работа:</b> - самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий); - подготовка к лабораторным занятиям; - подготовка к рубежному контролю.	<b>109,75</b>	<b>109,75</b>
<b>Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)</b>	<b>зачет</b>	

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Общая характеристика физико-химических методов исследования в органической химии	10	2	-	2	6
2	Масс-спектрометрические методы исследования строения органических соединений	28	4	-	2	22
3	Электронная УФ спектроскопия	26	2	-	4	20
4	Колебательная ИК спектроскопия	26	2	-	4	20
5	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	28	4	-	2	22
6	Комбинированные структурные методы органического анализа	26	4	-	2	20
	Всего:	144	18		16	110

## 4.2 Содержание разделов дисциплины

### 1 Общая характеристика спектральных методов анализа

Возникновение и развитие физических методов исследования строения органических соединений. Краткая характеристика спектральных методов. Комплексное использование спектральных методов в целях идентификации веществ и установления их химического строения. Области применения спектрального анализа, значение в современном мире.

### 2 Масс-спектрометрические методы исследования строения органических соединений

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. 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 ( $\alpha$ -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.

### 3 Электронная УФ спектроскопия

Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипсохромный 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. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

## 4 Колебательная ИК спектроскопия

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≡C, C<sub>аром</sub>–C<sub>аром</sub>, C<sub>sp3</sub>–H, C<sub>sp2</sub>–H, C<sub>sp</sub>–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, CONa, NO<sub>2</sub>, C≡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<sup>-1</sup>).

## 5 Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

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. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A<sub>2</sub>, AX, AB и A<sub>2</sub>B 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 J<sub>H–H</sub>. Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер <sup>13</sup>C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J<sub>C–H</sub>, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер <sup>13</sup>C и протонов. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР <sup>13</sup>C. Корреляционная спектроскопия ЯМР. 2D ЯМР (корреляции <sup>1</sup>H–<sup>1</sup>H: COSY, детектирование по ядрам углерода: <sup>13</sup>C–<sup>1</sup>H COSY (HETCOR), детектирование по протонам: <sup>1</sup>H–<sup>13</sup>C COSY (HMQC)). Спектроскопия на других важных ядрах со спином 1/2 (ЯМР <sup>15</sup>N, ЯМР <sup>19</sup>F, ЯМР <sup>31</sup>P).

## 6 Комбинированные структурные методы органического анализа

Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов. Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа, имеющих различную степень сложности.

### 4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1	2	Интерпретация масс-спектров	2
2	3	Запись и интерпретация УФ спектров	4
3	4	Запись и интерпретация ИК спектров	4
4	5	Интерпретация спектров ЯМР <sup>1</sup> H	2
5	5	Интерпретация спектров ЯМР <sup>13</sup> C	2
6	6	Решение задач с привлечением комплекса структурных методов анализа	2
		Итого:	16

## 5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

### 5.1 Основная литература

1. Кириллова Е.А. Методы спектрального анализа : учеб. пособие [Текст] / Е.А. Кириллова, В.С. Маряхина. - Оренбург. гос. ун-т. – Оренбург : ООО ИПК «Университет», 2013. – 106 с. - ISBN 978-5-4417-0324-6.
2. Маряхина В.С. Теоретические основы методов спектрального анализа [Текст] : учебное пособие для студентов, обучающихся по программам высшего образования по направлениям подготовки 04.03.01 Химия, 06.03.01 Биология / В. С. Маряхина, Е. А. Кунавина, Е. А. Строганова; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ, 2017. - 135 с. - ISBN 978-5-7410-1718-0.
3. Органическая химия : практикум: учеб. пособие [Текст ] / Е. А. Строганова [и др.] - Оренбург. гос. ун-т. - Оренбург : Университет, 2013. Ч. 3 : Применение методов УФ, ИК и ПМР спектроскопии в структурном анализе органических соединений. - 2013. - 116 с. - ISBN 978-5-4418-0035-8.

### 5.2 Дополнительная литература

1. Каньгина О. Н. Физические методы исследования веществ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / О. Н. Каньгина, А. Г. Четверикова, В. Л. Бердинский. - Оренбург. гос. ун-т. - Оренбург : ОГУ, 2014.
2. Преч Э. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных = Structure determination of organic compounds [Текст] / Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффельтер; пер. с англ. Б. Н. Тарасевича. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 440 с.
3. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. Основы, техника, аналитическое применение / А. Смит. - М.: Мир, 1982. – 328 с.
4. Иоффе Б.В. Физические методы определения строения органических соединений: учеб. пособие для химических вузов / Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин – М.: Высш. шк., 1984. - 336 с.

### 5.3 Периодические издания

1. Органическая химия : реферативный журнал. - М. : Агентство "Роспечать", 2008.
2. Успехи химии : журнал. - М. : Агентство "Роспечать", 2010.
3. Химия и жизнь - XXI век : журнал. - М. : Агентство "Роспечать", 2015.
4. Химия и жизнь : журнал. - М. : Наука, 2013.

### 5.4 Интернет-ресурсы

1. Электронная библиотека IQlib (образовательные издания, электронные учебники, справочные и учебные пособия) - <http://www.iqlib.ru/> .
2. Электронная библиотека Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (методическая и учебная литература, создаваемая в электронном виде авторами СПбГТУ по профилю образовательной и научной деятельности университета) - <http://www.unilib.neva.ru/rus/lib/resources/elib/>.
3. <http://www.msu.ru> Сайт Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова
4. <http://www.edu.ru/> Федеральный портал «Российское образование»

## 5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Операционная система MS Windows (в рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ).

2. Пакет настольных приложений Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint) (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ) для подготовки текстовых документов, обработки экспериментальных результатов и демонстрации презентаций.

3. ProQuestDissertations&Theses A&I [Электронный ресурс]: база данных диссертаций. – Режим доступа : <https://search.proquest.com/>, в локальной сети ОГУ.

4. SCOPUS [Электронный ресурс]: реферативная база данных / компания Elsevier. – Режим доступа: <https://www.scopus.com/>, в локальной сети ОГУ.

5. RoyalSocietyofChemistry [Электронный ресурс]: полнотекстовая база данных / Королевское химическое общество Великобритании. – Режим доступа: <http://pubs.rsc.org/>, в локальной сети ОГУ.

6. Springer [Электронный ресурс]: база данных научных книг, журналов, справочных материалов / компания Springer Customer Service Center GmbH. – Режим доступа: <https://link.springer.com/>, в локальной сети ОГУ.

7. Автоматизированная интерактивная система сетевого тестирования - АИССТ (зарегистрирована в РОСПАТЕНТ, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011610456, правообладатель – Оренбургский государственный университет), режим доступа - <http://aist.osu.ru>.

8. Консультант Плюс [Электронный ресурс] : справочно-правовая система / Компания Консультант Плюс. – Электрон. дан. – Москва. – Режим доступа : в локальной сети ОГУ <\\fileserv1\!CONSULT\cons.exe>

9. Бесплатное средство просмотра файлов PDF - AdobeReader;

10. Архиватор – WinRAR;

11. Свободный файловый архиватор - 7-Zip.

## 6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения лекционных и лабораторных занятий используются учебные аудитории кафедры химии. Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории. Для реализации лабораторного практикума используются приборы ЦКП «Института микро- и нанотехнологий»: спектрофотометр "Инфралюм ФТ-02", Спектрофлуориметр CM 2203. На лабораторных занятиях для интерпретации используются также спектры, записанные на приборах "Bruker DRX-500" (500,13 МГц) и "MERCURYplus-300" (300,05 МГц) в ДМСО- $d_6$  и  $CDCl_3$ , внутренний стандарт – TMS; спектрометре Finnigan MAT INCOS-50 в режиме прямого ввода (электронный удар).

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащено компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечено доступом в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.

### *К рабочей программе прилагаются:*

- Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.
- Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.