Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.В.6 Спектральный анализ»

Уровень высшего образования

СПЕЦИАЛИТЕТ

Специальность
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(код и наименование специальности)

Аналитическая химия
(наименование направленности (профиля)/специализации образовательной программы)

Квалификация
Химик. Преподаватель химии

Форма обучения
Очная

Год набора 2022

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.В.6 Спектральный анализ*» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии
наименование кафедры

протокол № 5 от "17" 01 2022

Заведующий кафедрой
Кафедра химии — подпись — Е.В. Сальникова
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

Исполнители:
доцент — подпись — Е.А. Кунавина
должность *подпись* *расшифровка подписи*

должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по специальности
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия — Е.В. Сальникова
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки
личная подпись Н.Н. Бигалиева
расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета
личная подпись А.Н. Сизенцов
расшифровка подписи

№ регистрации _____

© Кунавина Е.А., 2022
© ОГУ, 2022

1 Цели 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 ^{1}H и ЯМР ^{13}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 Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.17 Физика, Б1.Д.Б.18 Общий физический практикум, Б1.Д.Б.24 Органическая химия*

Постреквизиты дисциплины: *Б1.Д.В.12 Химический анализ в криминалистике, Б2.П.В.П.3 Научно-исследовательская работа, Б2.П.В.П.4 Преддипломная практика*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
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*-1-В-2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	**Знать:** основные методы сбора, обработки, анализа и обобщения результатов научных экспериментов; основные правила составления плана исследования **Уметь:** проводить научные исследования по сформулированной тематике; самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты **Владеть:** навыками анализа основных мировоззренческих и методологических проблем, в т.ч. междисциплинарного характера; технологиями планирования научных исследований.
ПК*-3 Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или	ПК*-3-В-2 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	**Знать:** возможные области применения результатов НИР и НИОКР **Уметь:** оценивать перспективы практического применения результатов НИР и НИОКР **Владеть:** навыками проведения критического анализа результатов НИР и НИОКР с целью определения перспектив их практического применения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
смежных с химией науках		

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

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

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	7 семестр	всего
Общая трудоёмкость	**144**	**144**
Контактная работа:	**69,25**	**69,25**
Лекции (Л)	34	34
Лабораторные работы (ЛР)	34	34
Консультации	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: *- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий);* *- подготовка к лабораторным занятиям;* *- подготовка к промежуточному контролю;* *- подготовка к рубежному контролю*	**74,75**	**74,75**
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	**экзамен**	

Разделы дисциплины, изучаемые в 7 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Общая характеристика спектроскопических методов анализа	6	2		-	4
2	Электронная УФ спектроскопия	20	4		4	12
3	Колебательная ИК спектроскопия	26	6		6	14
4	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	34	8		8	18
5	Масс-спектрометрические методы исследования строения органических соединений	34	8		8	18
6	Комбинированные структурные методы органического анализа	24	6		8	10
	Итого:	144	34		34	76
	Всего:	144	34		34	76

4.2 Содержание разделов дисциплины

1 Общая характеристика спектроскопических методов анализа

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

2 Электронная УФ спектроскопия

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. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

3 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, $C_{аром}$–$C_{аром}$, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, COHal, NO_2, 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 $см^{-1}$).

4 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_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. 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. 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. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C. Корреляционная спектроскопия ЯМР. 2D ЯМР (корреляции ^{1}H-^{1}H: COSY, детектирование по ядрам углерода: ^{13}C-^{1}H COSY (HETCOR), детектирование по протонам: ^{1}H-^{13}C COSY (HMQC)). Спектроскопия на других важных ядрах со спином ½ (ЯМР ^{15}N, ЯМР ^{19}F, ЯМР ^{31}P).

5 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 (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.

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	Запись и интерпретация УФ спектров	4
2	3	Запись и интерпретация ИК спектров	6
3	4	Интерпретация спектров ЯМР ^{1}H	2
4		Интерпретация спектров ЯМР ^{13}C	2
5		Интерпретация спектров 2D ЯМР (^{1}H-^{1}H COSY, ^{13}C-^{1}H COSY, ^{1}H-^{13}C COSY)	2
6		Интерпретация спектров ЯМР ^{15}N, ЯМР ^{19}F, ЯМР ^{31}P	2
7	5	Интерпретация масс-спектров	8
8	6	Решение задач с привлечением комплекса структурных методов анализа	8
		Итого:	34

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. Каныгина О. Н. Физические методы исследования веществ [Электронный ресурс] : учеб. пособие / О. Н. Кангина, 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. Аффольтер; 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. : Агенство "Роспечать", 2008.
2. Успехи химии : журнал. - М. : Агенство "Роспечать", 2010.
3. Химия и жизнь - XXI век : журнал. - М. : Агенство "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, [1992 – 2021]. – Режим доступа : в локальной сети ОГУ \\fileserver1\!CONSULT\cons.exe

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 СМ 2203. На лабораторных занятиях для интерпретации используются также ИК спектры, записанные на ИК-Фурье спектрометре Bruker Alpha; приставка НПВО, ZnSe); на ИК-Фурье спектрометре Vertex 70 (Bruker, Германия); диапазон 400-4000 $см^{-1}$, разрешение 2 $см^{-1}$, приставка НПВО, алмазный кристалл); спектры ЯМР, записанные на приборах "Bruker DRX-500" (500,13 МГц) и "MERCURYplus-300" (300,05 МГц) в ДМСО-d_6 и $CDCl_3$, Bruker AVANCE II (400 МГц), внутренний стандарт – ТМС; масс-спектры, записанные спектрометре Finnigan MAT INCOS-50 в режиме прямого ввода (электронный удар), а также на квадрупольно-времяпролётном масс-спектрометре сверхвысокого разрешения Orbitrap Elite, MicroTof Bruker Daltonics (в режиме электрораспылительной ионизации (ESI))

Для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используются специализированные аудитории, оснащенные необходимым оборудованием.

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