

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Физические методы исследования органических соединений М2.ДВ.1

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Бурилов В.А.

**Рецензент(ы):**

Антипин И.С.

### **СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_г

Регистрационный No 725814

Казань

2014

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. Бурилов В.А. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Vladimir.Burilov@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Цель дисциплины "Физические методы исследования органических веществ" - изучение основ теории и практики физико-химического анализа веществ, основных экспериментальных закономерностей, лежащих в основе физико-химических методов исследования, их связи с современными технологиями, а также формирование у студентов компетенций, позволяющих осуществлять идентификацию органических соединений основываясь на данных разных физических методов исследования молекул. В задачи дисциплины входит формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах и основных методах исследования физико-химических свойств и структуры веществ, а также овладение методологией основных методов физических исследований.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.ДВ.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина "Физические методы исследования органических веществ" изучается на первом курсе во втором семестре обучающимися по направлению 020100 "Химия", профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование". Предполагается, что студенты, изучающие данную дисциплину, прослушали курс "органическая химия" и "физическая химия"

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	Использует основные законы естественнонаучных дисциплин, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
ОК-7 (общекультурные компетенции)	Умеет работать с компьютером, на уровне пользователя и способен применять навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности
ОК-9 (общекультурные компетенции)	Владеет основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, имеет навыки работы с компьютером как средством управления информацией
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности
ПК-3 (профессиональные компетенции)	Способен применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных
ПК 6 (профессиональные компетенции)	Понимает необходимость и способен приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владеет ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК 7 (профессиональные компетенции)	Владеет навыками участия в работе научных коллективов, проводящих исследования по широкой филологической проблематике, подготовке и редактирования научных публикаций.

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- 1) базовую терминологию, относящуюся к физико-химическим методам исследования,
- 2) классификацию методов;
- 3) основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов

2. должен уметь:

- 1) продемонстрировать связь между различными физико-химическими методами исследования, структурой и свойствами веществ;
- 2) осуществить выбор соответствующего физико-химического метода исследования в зависимости от структуры вещества и поставленной задачи;
- 3) использовать закономерности физико-химических процессов и физико-химические методы исследования при выполнении курсовых и работ и интерпретации экспериментальных данных;
- 4) использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач;
- 5) применять соответствующие программные продукты для обработки данных.

3. должен владеть:

Навыками решения задач установления структуры соединения по данным физических методов исследования молекул.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

решить любую проблему, связанную с установлением структуры соединения по данным физических методов исследования молекул.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Общая характеристика физических методов исследования веществ	2	1	0	8	0	
2.	Тема 2. Метод ЯМР спектроскопии	2	2-5	0	8	0	
3.	Тема 3. Хромато-масс спектрометрия.	2	6-9	0	4	0	
4.	Тема 4. Метод ИК-спектроскопии	2	10-12	0	4	0	
5.	Тема 5. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях, Эмиссионная спектроскопия	2	13-15	0	4	0	
6.	Тема 6. Подготовка к зачету	2	16	0	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	зачет
	Итого			0	28	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Общая характеристика физических методов исследования веществ

#### *практическое занятие (8 часа(ов)):*

Методы определения физических свойств. Прямая и обратная задачи. Общая характеристика и классификация методов. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Интеграция методов.

### Тема 2. Метод ЯМР спектроскопии

#### *практическое занятие (8 часа(ов)):*

Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Анализ спектров ЯМР первого и не первого порядков. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР. Характер образцов.

### Тема 3. Хромато-масс спектрометрия.

#### *практическое занятие (4 часа(ов)):*

Основы масс-спектрометрии. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, электро-статическое неоднородное поле, химическая ионизация. Комбинированные методы. Ионный ток и сечение ионизации. Потенциалы появления ионов. Вертикальные и адиабатические электронные переходы. Диссоциативная ионизация. Типы ионов в масс-спектрометрах. Принципиальная схема масс-спектрометра Демпстера. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Хромато-масс спектрометрия как один из мощнейших инструментов для идентификации сложных органических смесей.

#### **Тема 4. Метод ИК-спектроскопии**

##### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Описание колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Техника и методики ИК спектроскопии Аппаратура ИК спектроскопии, приготовление образцов.

#### **Тема 5. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях, Эмиссионная спектроскопия**

##### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора и нарушения запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Спектры сопряженных систем в электронных спектрах поглощения. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый выход люминесценции). Закономерности люминесценции. Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа.

#### **Тема 6. Подготовка к зачету**

### **4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Общая характеристика физических методов исследования веществ	2	1	Подготовка к опросу по заданной теме	6	Опрос по заданной теме
2.	Тема 2. Метод ЯМР спектроскопии	2	2-5	Подготовка к опросу по теме спектроскопия ЯМР	6	Опрос по заданной теме
3.	Тема 3. Хромато-масс спектрометрия.	2	6-9	Подготовка к опросу по теме хромато-масс спектрометрия	6	Опрос по заданной теме



N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
4.	Тема 4. Метод ИК-спектроскопии	2	10-12	Подготовка к опросу по теме ИК спектрометрия	6	Опрос по заданной теме
5.	Тема 5. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях, Эмиссионная спектроскопия	2	13-15	Подготовка к опросу по теме спектральные методы анализа.	6	Опрос по заданной теме
6.	Тема 6. Подготовка к зачету	2	16	Подготовка к зачету	14	Зачет
	Итого				44	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

1. Лекции, практические занятия.
2. Семинар в диалоговом режиме с использованием интерактивных электронных учебников и учебных пособий
3. Групповой разбор результатов контрольных работ
4. Групповые дискуссии - по результатам курсовых и научно-исследовательских работ
5. Мозговой штурм

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

### Тема 1. Общая характеристика физических методов исследования веществ

Опрос по заданной теме , примерные вопросы:

Роль и место физико-химических методов в исследовании веществ. Общая характеристика методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Классификация физических методов: спектральные, дифракционные, электрические и магнитные. Шкала электромагнитных волн и краткая характеристика основных спектральных методов в различных диапазонах.

### Тема 2. Метод ЯМР спектроскопии

Опрос по заданной теме , примерные вопросы:

Физические основы ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Анализ спектров ЯМР первого порядка. Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров. Характер образцов.

### Тема 3. Хромато-масс спектрометрия.

Опрос по заданной теме , примерные вопросы:

Общая характеристика метода. Основы масс-спектрометрии. Масс спектрометрия электронного удара. Молекулярный и осколочные ионы. Хроматография. Время удерживания. Устройство хромато-масс спектрометра. Требования к образцам.

#### **Тема 4. Метод ИК-спектроскопии**

Опрос по заданной теме , примерные вопросы:

Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Исследования динамической изомерии, равновесий, кинетики реакций. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР, преимущества лазерных источников возбуждения.

#### **Тема 5. Электронная спектроскопия в видимой и УФ областях, Эмиссионная спектроскопия**

Опрос по заданной теме , примерные вопросы:

Общая характеристика свойств электронных состояний. Колебательные и электронные энергетические уровни двухатомной молекулы. Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательным и состояниями. Принцип Франка-Кондона. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Правила отбора и нарушения запрета. Специфика электронных спектров поглощения различных классов соединений. Электронные спектры комплексов переходных металлов. Теория кристаллического поля. Спектрохимический ряд. Возможности ЭСП в определении параметра поглощения  $\Delta$ . Правило отбора и интенсивность ЭСП для координационных соединений. Спин-орбитальное взаимодействие. Эффект Яна-Теллера Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях .

#### **Тема 6. Подготовка к зачету**

Зачет , примерные вопросы:

Повторение пройденного материала

#### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Какова роль физических методов в химии?
2. Дайте определение прямой и обратной задачи физического метода.
3. Назовите наиболее важные характеристики спектроскопических методов исследования.
4. Раскройте сущность дифракционных методов исследования. Области применения.
5. Как можно определить характеристическое время метода?
6. Какие молекулы имеют собственный дипольный момент?
7. Что такое обертоны и составные частоты? Чем обусловлено их появление в ИК спектрах?
8. Перечислите основные области применения ИК спектроскопии, приведите примеры.
9. Какими основными свойствами характеризуются электронные состояния молекул?
10. По каким признакам можно идентифицировать в УФ спектре полосу поглощения  $n \rightarrow \pi^*$  перехода? Чем объясняются сдвиги этой полосы при изменении полярности растворителя?
11. Как влияет сопряжение хромофорных групп на их электронный спектр? Как отражается на интенсивности  $\pi \rightarrow \pi^*$  полосы поглощения изменение конформации сопряженной системы двойных связей?
12. Охарактеризуйте условия получения и способы изображения электронных спектров.
13. Как выражается энергия взаимодействия ядра, обладающего ненулевым спином, с внешним магнитным полем?



14. Каковы условия ядерного магнитного резонанса?
15. Что такое спин-решеточная и спин-спиновая релаксация?
16. Перечислите и запишите выражение и шкалы химических сдвигов в ЯМР.
17. Что такое константа экранирования ядра?
18. Объясните природу спин-спинового взаимодействия? Какие сведения дает величина константы спин-спинового взаимодействия?
19. Укажите основные параметры и характерные черты спектров ЯМР первого порядка.
20. Какие молекулы могут быть охарактеризованы методом хромато-масс спектрометрии?
21. Что такое время удерживания?
22. Какие параметры влияют на время удерживания в методе хромато-масс спектрометрии?

### 7.1. Основная литература:

1. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности 011000 "Химия" и направлению подготовки 510500 "Химия" / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков .? Москва : Мир, [2012] .? 683 с.,
2. Шабаров Ю. С. Органическая химия. - 5-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2011. - 848 с.[http://e.lanbook.com/books/element.phppl1\\_cid=25&pl1\\_id=4037](http://e.lanbook.com/books/element.phppl1_cid=25&pl1_id=4037)
3. Каратаева, Ф.Х. Спектроскопия ЯМР в органической химии : [учебное пособие] / Ф. Х. Каратаева, В. В. Клочков .? Казань : Казанский университет, 2013 .? ; 21. Ч. 1: Общая теория ЯМР. Химические сдвиги  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  .? 2013 .? 130 с. : ил. ? Библиогр.: с. 129-130 (19 назв.) .? ISBN 978-5-00019-052-4 ((в обл.) ) , 100.
4. Каратаева Ф.Х., Клочков В.В. Спектроскопия ЯМР в органической химии. Часть I. 2013. (Для студентов и аспирантов химического и биологического факультетов)  
Подробности: [http://kpfu.ru/publication?p\\_id=68614](http://kpfu.ru/publication?p_id=68614)
5. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости. - М.: Физматлит, 2010. - 384 с.  
[http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=2151](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=2151)

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Габуда С. П., Козлова С. Г. Неподделенные электронные пары и химическая связь в молекулярных и ионных кристаллах: мультядерная ЯМР-спектроскопия, магнетохимия, электронные корреляционные взаимодействия и релятивистские эффекты. Новосибирск Изд-во Сибирского отделения Российской академии наук, 2009. 164 с.
2. Бердников, Евгений Александрович. Задачи и упражнения по ЯМР-спектроскопии в органической химии: [учеб. пособие] / Е.А. Бердников, М.А. Казымова; Казан. гос. ун-т, Хим. ин-т им. А.М. Бутлерова, Науч.-образоват. центр Казан. гос. ун-та "Материалы и технологии XXI века". - Казань: [КГУ], 2007.-; 29.Ч. 1. - 2007. - 103 с.
3. Камалова Д. И., Салахов М. Х. Лекции по прикладной инфракрасной спектроскопии: учебное пособие. Казань Казанский государственный университет, 2009. 167 с.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

- База данных масс-спектров. - <http://www.massbank.jp/>
- База данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония. - [http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)
- База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. - <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- Практический курс спектроскопии ЯМР - [http://www.chem.msu.su/rus/teaching/nifantev/2006\\_NMR.pdf](http://www.chem.msu.su/rus/teaching/nifantev/2006_NMR.pdf)

Учебное пособие по ЯМР спектроскопии -  
[http://www.kpfu.ru/docs/F413273025/NMR\\_spectroscopy\\_1.pdf](http://www.kpfu.ru/docs/F413273025/NMR_spectroscopy_1.pdf)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Физические методы исследования органических соединений" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

ЯМР Bruker Nanobay;  
хромато-масс спектрометр SHIMADZU GCMS 2010,  
ИК спектрометр Bruker,  
UV-VIS спектрофотометр SHIMADZU UV 3000  
спектрофлуориметр JOBIN IVON.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Бурилов В.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.