

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

- готовностью действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2);
- способностью реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях (ОПК-3);
- готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3).

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести:

Знать:

- в совершенстве практику и организационные подходы к научной работе в исследовательских лабораториях по физико-химическим исследованиям органических соединений;

Уметь:

- использовать возможности современных теоретических и экспериментальных подходов для решения задач современной физико-химических методов исследования органических соединений, корректно интерпретировать экспериментальные данные для решения различных научно-исследовательских задач в сфере профессиональной деятельности;

Владеть:

- основными методами анализа органических соединений на уровне эксперта, компьютерными технологиями в химии на уровне пользователя.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Б1.В.ДВ.4.1 Вариативная часть. Дисциплины по выбору

Для изучения дисциплины необходимы знания, умения и компетенции, полученные обучающимися в бакалавриате в результате освоения курсов: «Органическая химия», «Методы синтеза органических соединений», «Физические методы исследования», «Квантовая механика и квантовая химия», «Строение вещества», «Физическая химия», «Физико-химические методы исследования органических соединений», «Моделирование учебного процесса и эвристическое программирование исследовательской деятельности», «Системное моделирование», и т.д.

3. Содержание дисциплины:

Введение. Цель, задачи и содержание курса. Понятие о физико-химических методах исследования. Классификация физико-химических методов исследования органических соединений. Общая характеристика физико-химических методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Относительность разделения методов на физические и физико-химические методы.

Физико-химические методы очистки и разделения органических соединений:

1. Кристаллизация и перекристаллизация. Техника работы. Применение. Примеры.
2. Экстракция. Физико-химические основы экстракции. Техника работы. Примеры.
3. Перегонка. Физико-химические основы перегонки веществ. Классификация методов перегонки: простая перегонка, дробная и фракционная перегонка, перегонка с водяным паром, перегонка под вакуумом, молекулярная перегонка. Техника работы. Примеры.
4. Сублимация (возгонка). Физико-химические основы сублимации. Техника работы. Применение. Примеры.
5. Зонная плавка. Физико-химические основы зонной плавки. Техника работы. Примеры.
6. Хроматография. Физико-химические основы сорбции. Классификация методов хроматографии по механизму сорбции:
 - Адсорбционная хроматография. Типы изотерм сорбции. Техника эксперимента. Примеры применения.
 - Распределительная хроматография. Физико-химические основы распределительной хроматографии. Техника эксперимента.
 - Ион-обменная хроматография. Физико-химические основы ион-обменной хроматографии. Техника эксперимента.

Физические и физико-химические методы идентификации органических веществ. Определение важнейших физических констант: температуры кипения, температуры плавления, относительной плотности, показателя преломления, молекулярной массы, молекулярной рефракции, удельного и молекулярного вращения, хроматографических констант.

Термохимия органических реакций. Калориметрия как экспериментальный метод термохимии. Типы калориметров. Адиабатический калориметр и его устройство. Изотермический калориметр и его особенности. Теплопроводящий калориметр. Прибор Тиана—Кальве. Микрокалориметрия и её возможности.

Рефрактометрия. Рефрактометрические методы исследования органических веществ. Показатель преломления и его экспериментальное определение. Удельная рефракция. Поляризуемость и её связь с удельной и молекулярной рефракцией. Формула Лорентца-Лоренца. Аддитивность молекулярной рефракции. Атомные рефракции. Структурные инкременты и групповые рефракции. Рефракции связей. Соотношение между рефракциями связей и атомными рефракциями. Границы приложимости аддитивной схемы. Экзальтация молекулярной рефракции. Возможности уточнения аддитивной схемы расчёта с учётом влияния не связанных непосредственно атомов.

Метод дипольных моментов. Поляризация неполярного вещества в постоянном электрическом поле. Поляризуемость. Молярная поляризация. Поляризация полярных веществ. Уравнение Ланжевена—Дебая. Первый метод Дебая. Поляризация в переменных электрических полях. Второй метод Дебая.

Поляриметрические методы в органической химии. Понятие об оптически активных веществах. Физические основы явления оптической активности. Природа оптического вращения. Понятие о плоско поляризованном свете. Вращение плоскости поляризации. Схема поляриметра. Зависимость величины угла вращения плоскости поляризации от условий измерения.

Спектрополяриметрия. Принцип устройства спектрополяриметра. Виды кривых дисперсии оптического вращения. Эффект Коттона. Понятие о правиле октантов. Определение относительной и абсолютной конфигурации. Применение плавных кривых дисперсии оптического вращения (доказательство наличия оптической активности, выявление структурных аналогий).

Спектроскопические методы исследования в органической химии. Взаимодействие вещества с электромагнитным излучением. Закон Планка—Бора. Поглощение излучения и его эмиссия. Понятие об абсорбционной и эмиссионной спектроскопии. Характеристика электромагнитного излучения. Понятие об электронных, колебательных и вращательных переходах. Энергетическая характеристика переходов и классификация методов абсорбционной спектроскопии

Электронная абсорбционная спектроскопия. Принципиальная схема оптического спектрофотометра. Основной закон светопоглощения Ламберта—Бугера—Бера. Понятие электронного спектра. Способы графического изображения электронных спектров. Энергетические уровни двухатомных молекул. Принцип Франка—Кондона. Электронные спектры многоатомных молекул. Классификация электронных переходов. Интенсивности электронных переходов. Правила отбора. Возбуждённые состояния молекул. Понятие о синглетных и триплетных состояниях. Пути дезактивации возбуждённых состояний.

Методы колебательной спектроскопии. Основы классической теории колебательных спектров. Гармонический осциллятор. Колебания двухатомной молекулы. Закон Гука. Эмпирическая формула Морзе. Валентные и деформационные колебания. Правила отбора в инфракрасных (ИК) и комбинационно рассеянных (КР) спектрах.

Инфракрасная спектроскопия. Блок-схема двухлучевого ИК-спектрофотометра. Выбор оптимальных условий съёмки: толщина слоя поглощающего вещества, характер призмы, ширина выходной щели монохроматора, степень усиления сигнала детектора, скорость развёртки спектра. Наиболее распространённые недостатки инфракрасных спектрограмм, способы их устранения. Особенности ИК-спектров важнейших классов органических соединений. Парафины и циклопарафины. Олефины. Ацетилены. Ароматические углеводороды. Спирты. Простые эфиры. Амины. Нитрилы. Нитро- соединения. Галогенпроизводные. Сернистые соединения.

Спектроскопия комбинационного рассеяния. Схема эксперимента. Особенности техники спектроскопии комбинационного рассеяния света. Природа комбинационно-го рассеяния света.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Магнитные свойства ядер. Явление ядерного магнитного резонанса в классической трактовке (прецессия магнитных моментов ядер во внешнем магнитном поле, векторная диаграмма).

Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса. Физическая природа явления. Теоретические основы метода электронного парамагнитного резонанса (ЭПР): условие ЭПР, положение резонансного сигнала и g -фактор, электрон-ядерное взаимодействие и сверхтонкая структура спектра ЭПР, электрон-электронное взаимодействие и тонкая структура спектров ЭПР анизотропных систем.

Масс-спектрометрия органических соединений. Ионизация атомов и молекул. Типы ионов: молекулярные, осколочные, перегруппировочные, метастабильные, отрицательные, многозарядные. Методы ионизации: метод ионизации электронным ударом, метод фотоионизации, ионизация электрическим полем, химическая ионизация, поверхностная ионизация, комбинированные методы ионизации. Принципиальная схема магнитного масс-спектрометра. Основное уравнение масс-спектрометрии. Характеристики масс-спектрометра.

Методы изучения кинетики и механизмов органических реакций. Применение физико-химических методов для исследования кинетики органических реакций (кинетические методы). Изучение механизмов органических реакций с помощью изотопных методов.

4. Объем дисциплины: 5 зачетных единиц.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

6. Разработчик: к.х.н., доцент кафедры органической химии А.А. Арутюнянц