

Одеський національний університет ім. І.І Мечнікова

(повна назва вищого навчального закладу)

Кафедра органічної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор

“___” _____ квітня _____ 2013__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук

_____ (шифр і назва навчальної дисципліни)

напряму підготовки _____

(шифр і назва напряму підготовки)

для спеціальності _____ 6.070.301 Хімія

_____ (шифр і назва спеціальності (тей))

спеціалізації _____

(назва спеціалізації)

інституту, факультету _____ хімічного _____

(назва інституту, факультету)

**Кредитно-модульна система
організації навчального процесу**

2013 – 2015 р.

Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук_____. Робоча програма навчальної дисципліни для студентів

(назва навчальної дисципліни)

за напрямом підготовки 6.040.101_____, спеціальністю органічна хімія_____. „__” квітня _____, 2013 р. - __ с.

Розробники: (вказати авторів, їхні наукові ступені, вчені звання та посади).

Доцент кафедри органічної хімії, кандидат хімічних наук

Колянковський Олександр Олександрович

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри (циклової, предметної комісії)_____

Протокол № 6 __ від. “16 __” квітня _____ 2013 __ р.

Завідувач кафедрою (циклової, предметної комісії)_____

_____ (Волошановський І.С.)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

“__” __ квітня _____ 2013 __ р

Схвалено методичною комісією за напрямом підготовки (спеціальністю) 6.040.101_____

(шифр, назва)

Протокол № __ від. “__” _____ 2013 __ р.

“__” _____ 2013 __ р. Голова _____ (Солдаткіна Л.М.)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

©Колянковський О.О , 2013 р

©ОНУ, ім. І.І Мечникова, 2013р.

1. Опис навчальної дисципліни

| | | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|------|
| Найменування показників | Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень | Характеристика навчальної дисципліни | |
| | | <i>денна форма навчання</i> | |
| Кількість кредитів –4 | Галузь знань 6.040.101,Хімія _____ (шифр і назва) | <i>Денна форма навчання</i> | |
| | Напрямок підготовки _____ (шифр і назва) | | |
| Модулів – 2 | Спеціальність (професійне спрямування): _____ | <i>Рік підготовки:</i> | |
| Змістових модулів –2 | | 5-й | |
| Індивідуальне науково-дослідне завдання не передбачено програмою _____ (назва) | | <i>Семестр</i> | |
| Загальна кількість годин - 132 | | 9-й | |
| Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 10 самостійної роботи студента -5 | Освітньо-кваліфікаційний рівень: Мгістр,спеціаліст | <i>Лекції</i> | |
| | | 32 год. | |
| | | <i>Практичні, семінарські</i> | |
| | | год. | год. |
| | | <i>Лабораторні</i> | |
| | | 50 год. | . |
| | | <i>Самостійна робота</i> | |
| | | 32 год. | . |
| <i>ІНДЗ: 18 год.</i> | | | |
| Вид контролю: підсумкова атестація | | | |

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета : надати студентам теоретичні знання та практичні навички з фізико-хімічних методів дослідження, ідентифікації та встановлення будови складних органічних речовин.....

Завдання : вивчення основ курсу дозволить студенту використовувати найбільш ефективні методи для конкретної сполуки, користуватися спектральними даними, правильно вибрати методи дослідження, знати границі застосування методів спектроскопії, рефрактометрії і навпаки маючи органічну речовину передбачити фізико-хімічну характеристику.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен знати: фізико-хімічні основи різноманітних методів, межі їх застосування та су-місне їх використання для встановлення будови органічних сполук.

вміти: застосовувати на практиці методи дослідження, вибирати найбільш ефек-тивні, надійні та інформативні методи. Студент повинен

вміти: ідентифікувати органічну сполуку по її фізико-хімічним показни-кам **вміти** встановлювати будову простих або складних органічних речовин застосовуючи окремі методи **вміти** якщо необхідно застосовувати їх ком-плекс

3 .Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Виділення, очистка та ідентифікація органічних речо-вин.

Тема 1.

Перегонка, її фізичні основи. Характеристика різних видів перегонки (проста перегонка, перегонка з колонкою Вігре, перегонка в вакуумі, на різноманітних ректифікаційних колонках) та її можливості. Перегонка з водяною парою. Зв'язок розчинності органічних сполук в воді та органічних розчинниках з їх летючістю та можливістю переганятися з водяною парою. Сублімація. Пере-кристалізація. Характеристика розчинників та бінарних сумішей, які найчас-тіше використовуються для перекристалізації, їх вибір. Техніка проведення цих методів виділення органічних сполук.

Тема 2

.Характеристика основних фізичних констант, які використовуються для іден-тифікації органічних сполук, та методів їх визначення Температури плавлення, замерзання та кипіння органічних сполук та можливості їх використання для ідентифікації органічних сполук. Методи визначення температури: а) плавлен-ня (в приладі Тіле, в найпростішому приладі, в приладах Mel-Temp, Фішера-Джонса та Нальджа Аксельрода); б) замерзання; в) кипіння (в приладі для пере-гонки, по Сиволобову, по Еміху, по Держстандарту та в ебуліометрі). Введення поправок на визначені величини. Вплив тиску на температуру кипіння. Густина та методи її визначення. Перерахунок d_{20}^{20} в d_4^{20} . Показник заломлення рідин та його визначення. Молекулярна рефракція та її визначення. Молекулярна ма-са органічних сполук та її визначення (методом Раства, осмометрії та ін.). Метод змішаних проб та його використання для ідентифікації органічних сполук.

Змістовий модуль 2. Спектральні методи

Тема 3

Взаємодія органічної речовини з електромагнітним коливанням. Електрома-гнітний спектр, його хвильова та енергетична характеристика. Природа взаємо-дії опромінення з речовиною в залежності від її енергії.

Оптичні методи спектроскопії. Розподіл оптичних спектрів відповідно до енергії та поглинаючої структури молекули (ядро атома, електрони зв'язку σ - та π - тощо). Спектри поглинання та закони поглинання електромагнітного ко-

ливання органічною речовиною. Закон Бугера-Бера. Характеристика поведінки органічної речовини у розчині (асоціація, дисоціація, комплексоутворення тощо). Експериментальні методи перевірки закону Бугера-Бера, умови його виконання. Характеристика спектру у адсорбційній спектрофотометрії

Тема 4

..Електронні спектри (УФ спектроскопія).

Природа електронних спектрів. Типи енергетичного переходу електронів $\sigma \rightarrow \sigma^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$. Правила відбору переходів.

Ультрафіолетове поглинання вуглеводнів та їх простих похідних. Поглинання сполук з ізольованими хромофорами ($>C=C<$, $-C\equiv C-$, $>C=N-$, $-C\equiv N$, $-N=N-$ тощо). Особливості поглинання речовин із супряженими кратними зв'язками та n -електронами. Емпіричне правило Вудворда для встановлення максимуму поглинання та довжини хвилі. Поглинання α, β -ненасичених карбонільних сполук, боксильних сполук, правило Вудворда. Спектри поглинання ароматичних сполук. Залежність характеру поглинання від електронного впливу замісників. Взаємний вплив замісників. Поглинання конденсованих ароматичних сполук. Поглинання гетероциклічних п'яти та шестичленних систем.

Техніка зняття УФ спектрів. Поглинання розчинників застосованих в УФ спектроскопії. Вплив розчинника на характер УФ спектру.

Тема 5 .

Спектри коливання (ІЧ та КРС спектроскопія).

Природа спектрів коливання. Інфрачервона спектроскопія та комбінаційного розсіяння. Симетрія молекул та правила відбору. Поняття про форми коливань зв'язку (валентні, деформаційні). Уявлення про характеристичність поглинання. Вуглеводні. Валентні та деформаційні коливання $C-H$ зв'язку. Застосування поглинання в області 7700 та 3200 см^{-1} для якісного і кількісного аналізу. ІЧ спектри циклоalkanів, алкенів. Валентне поглинання зв'язку $>C=C<$ $C-H$ у sp^2 -гібридизованого атома. Спектри алкенів цис- та транс-ізомерів. Спектри алкінів, валентні коливання $C-H$ у sp -гібридизованого атома.

ІЧ поглинання ароматичних вуглеводнів. Застосування деформаційних коливань для встановлення характеру заміщення у циклі.

Валентні коливання $O-H$ та $C-O$ у спиртах та кислотах. Водневі зв'язки, їх виявлення в ІЧ спектрах.

Валентні коливання $C=O$ групи. Вплив будови та характеру карбонільної групи на межі поглинання. Вплив міжмолекулярних і внутрішньомолекулярних взаємодій на характер поглинання карбонілу. Валентні коливання $N-H$, $C-N$ зв'язків амінів, амідів.

Поглинання $N-H$, $C-N$ зв'язку та вплив різних факторів на характер і межі поглинання. Деформаційне поглинання $N-H$ зв'язку. Поглинання нітрильної та азометинової групи в ІЧ області.

Техніка зняття ІЧ спектрів. Вплив агрегатного стану речовини на характер поглинання. Розчинники, застосовані в ІЧ спектроскопії. Розшифровка ІЧ спектрів.

Тема 6

Радіохвильові методи. Ядерний магнітний резонанс (ЯМР), протонний магнітний резонанс (ПМР). Загальна характеристика метода ЯМР. Принципи роботи приладу ЯМР. Магнітний момент ядер, гіромагнітне співвідношення. Хімічний зсув. Природа хімічного зсуву. Хімічний зсув, шкала δ і τ . Хімічний зсув протонів і вплив різноманітних факторів та структури на його межі. Хімічний зсув протонів вуглеводнів у зв'язку $C=C$, $C\equiv C$ та в ароматичних системах.

Екранізація та деекранізація ядер. Особливості хімічного зсуву протонів ОН груп спиртів, карбонових кислот та NH груп амінів. Інтегральна та диференціальна інтенсивність поглинання.

Спін-спінова взаємодія та мультиплетність сигналів протонів. Константа спін-спінової взаємодії. Характеристика різних систем протонів АВ, A_2B , A_3B , АХ, АВХ і інших. Розшифровка спектрів ПМР у структурному аналізі органічних сполук.

Змістовний модуль 3. Іонізаційні методи.

Тема 7 Мас-спектрометрія, спектроскопія (МС).

Принципи роботи мас-спектрометра. Методи іонізації органічних речовин. Типи органічних іонів: молекулярні, моноізотопні, осколкові, метастабільні та інші. Виявлення молекулярного іону, якісний та кількісний аналіз органічної речовини. Умови та головні напрямки фрагментації молекули органічної речовини (алканів, алкенів, аренів). Напрямки фрагментації спиртів, етерів, тіоспиртів, амінів, карбонових кислот. Фрагментація алкіл- та арілгалогенідів. Мас-спектр – структура органічної речовини.

Тема 8. Рефрактометрія.

Встановлення і розрахунки молекулярної рефракції. Встановлення структури органічних сполук за допомогою рефрактометрії. Приклади структурного аналізу за молекулярною рефракцією. Застосування дисперсії молекулярної рефракції

Сумісне застосування спектральних методів: УФ та ІЧ, ІЧ та ПМР, УФ, ІЧ та ПМР спектроскопії для встановлення будови органічних речовин

4. Структура навчальної дисципліни

| Усього | | у тому числі | | | | |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|--------------|---|-----|-----|----|
| | | л | п | лаб | інд | ср |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| Змістовний модуль 1. Виділення, очистка та ідентифікація органічних сполук | | | | | | |
| Тема 1 Виділення, очистка органічних речовин | 8 | 1 | - | 2 | 2 | 3 |
| Тема 2 Встановлення фіз.-хім констант орг.. сполук | 10 | 1 | | 4 | 2 | 3 |
| Разом за змістовним модулем 1 | 18 | 2 | | 6 | 4 | |
| Змістовний модуль 2. Спектральні методи дослідження | | | | | | |
| Тема 3 Класифікація спектральних методів дослідження | 13 | 2 | | 6 | 2 | 3 |
| Тема 4 Електроні спектри, УФ-спектроскопія | 17 | 6 | | 6 | 2 | 3 |
| Тема 5 Спектри коливання (ІЧ та КР) | 20 | 6 | | 10 | 2 | 2 |
| Тема 6 ЯМР та ПМР протонний магнітний резонанс | 23 | 8 | | 10 | 2 | 3 |
| Разом за змістовним модулем 2 | 73 | 22 | | 32 | 8 | 11 |
| Змістовний модуль 3. Іонізаційні методи дослідження | | | | | | |
| Тема 7 Мас -спектрометрія (МС) | 18 | 6 | | 6 | 3 | 3 |
| Тема 8 Рефрактометрія | 14 | 2 | | 6 | 3 | 3 |
| Разом за змістовним модулем 3 | 32 | 8 | | 12 | 6 | 6 |
| Усього годин | 123 | 32 | | 50 | 18 | 23 |

5. Теми семінарських занять
(не передбачено навчальним планом)

6. Теми практичних занять
(не передбачено навчальним планом)

7. Теми лабораторних занять

| № | Назва теми | Кількість |
|---|------------|-----------|
|---|------------|-----------|

| з/п | | ГОДИН |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | Визначення фізико-хімічних констант та застосування їх для ідентифікації | 4 |
| 2 | Дослідження умов виконання закону Ламберта-Бугера-Бера, розрахунки λ_{\max} по Вудворду | 2 |
| 3 | Встановлення молекулярної ваги 8 орг. сполук. Задачі | 4 |
| 4 | Аналіз суміші ізомерних ксилолів (ІЧ) | 4 |
| 5 | Утворення та інтерпретація ІЧ спектрів вуглеводнів та їх похідних | 6 |
| 6 | Вивчення кето-енольної таутомерії (ІЧ) ацетооцтового естеру | 6 |
| 7 | Вивчення водневого зв'язку спиртів, фенолів та карбонових кислот. Задачі 1-9 | 6 |
| 8 | Розв'язання задач ПМР спектроскопії протонів АВ, АХ, АВХ (1-12) | 8 |
| 9 | Розв'язання задач на сумісне застосування УФ, ІЧ, ПМР спек. | 5 |
| 10 | Зняття мас-спектрів 5 орг. сполук різних класів та встановлення молекулярного, дочірнього та ізотопних іонів | 5 |
| | Разом | 50 |
| | | |

8. Самостійна робота

| № з/п | Назва теми | Кількість годин |
|-------|----------------------------------------------------------------------------|-----------------|
| 1 | Розрахувати λ_{\max} ненасичених карбонільних сполук. | 6 |
| 2 | Встановити характеристичні смуги поглинання.. 10 сполук. | 8 |
| 3 | Розрахувати хім.зсув та мультиплетність протонів АВ, А ₂ В, АВХ | 10 |
| 4 | Вказати можливий якісний склад М та М+2 іонам | 8 |
| | Разом | 32 |

9. Індивідуальне навчально - дослідне завдання (не передбачено навчальним планом)

10. Методи навчання

Лекції, виконання лабораторних робіт, практичних, контрольних робіт та самостійна робота

11. Методи контролю

Контрольні роботи, тестові завдання, лабораторні роботи, залік, підсумкова атестація.

12. Розподіл балів, які отримують студенти

Приклад для заліку

| Поточне тестування та самостійна робота | | | | | | | | | Сума |
|-----------------------------------------|----|----|----|----|----------------------|----|----|----|------|
| Змістовий модуль №1 | | | | | Змістовий модуль № 2 | | | | |
| T1 | T2 | T3 | T4 | T5 | T6 | T7 | T8 | T9 | 100 |
| 12 | 12 | 12 | 12 | 12 | 10 | 10 | 10 | 10 | |

T1, T2 ... T9 – теми змістових модулів

Шкала оцінювання: національна та ECTS

| Сума балів за всі види навчальної діяльності | Оцінка ECTS | Оцінка за національною шкалою | |
|----------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|
| | | для екзамену, курсового проекту (роботи), практики | для заліку |
| 90 – 100 | A | відмінно | зараховано |
| 82-89 | B | добре | |
| 74-81 | C | | |
| 64-73 | D | задовільно | |
| 60-63 | E | | |
| 35-59 | FX | незадовільно з можливістю повторного складання | не зараховано з можливістю повторного складання |
| 0-34 | F | незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни | не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни |

13. Методичне забезпечення

1. Волошановський І.С, Колянковський О.О, Мамонтов В.П Методичний посібник ч 1-3, ОНУ, 1983р.
2. Колянковський О.О, Федько Н Ф, Методичний посібник фіз.-хім методів дослідження., 2013р. ОНУ.

14. Рекомендована література

1. Б.В.Иоффе, Р.Р.Костиков, В.В.Разин Физические методы определения строения органических молекул. Л., 1976, 344
2. Л.А.Казицына, Н.Б.Куплетская Применение УФ, ИК и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М., 1971, 264.
3. Б.И.Иони, Б.А.Ершов А.И.Кольцов ЯМР-спектроскопия в органической химии. Л., 1983, 270.
4. П.Б.Терентьев. Масс-спектрометрия в органической химии. М., 1983, 224.
5. И.Г.Зенкевич, Б.В.Иоффе. Интерпретация масс-спектров органических соединений.

Допоміжна

Э.Преч,Ф.Бюльманн,К.Аффольтер Определение строения органических соединений,М.,Мир,2012,-438

15. Інформаційні ресурси

1..http /yandex.ua...

3.http/booksonchemistry.com

2.http/www.tvirpx.com.

4.http/www chem.msu/rus.