Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ВШТЭ

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
СВЕДЕНИЯ О СЕРТИФИКАТЕ ЭП
Сертификат: 24ffcf72c62eeacf5b7c42863ce15766
Владелец: Луканин Павел Владимирович
Действителен: с 30.05.2022 по 23.08.2023

Рабочая программа дисциплины

Б1.О.09 Теоретические и экспериментальные методы исследований

Учебный план: ФГОС3++m180401.12-12_23-12.plx

Кафедра: 12 Органической химии

Направление подготовки: (специальность) 18.04.01 Химическая технология

Профиль подготовки: (специализация) Химия и технология продуктов тонкого органического синтеза

Уровень образования: магистратура

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Практ. занятия	Лаб. занятия				
2	УП	17	34	21	36	3	Экзамен
	РПД	17	34	21	36	3	
Итого	УП	17	34	21	36	3	
	РПД	17	34	21	36	3	

Санкт-Петербург
2023

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология, утверждённым приказом Минобрнауки России от 07.08.2020 г. № 910

Составитель (и):

Доктор химических наук, профессор — Анисимова Н.А.

От кафедры составителя: — Тришин Ю.Г.
Заведующий кафедрой органической химии

От выпускающей кафедры: — Тришин Ю.Г.
Заведующий кафедрой

Методический отдел: — Смирнова В.Г.

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать компетенции обучающегося в области современных теоретических и экспериментальных методах исследования.

1.2 Задачи дисциплины:

• Сформировать прочные знания о важнейших современных экспериментальных методах исследования.

• Рассмотреть современные теоретические методы исследования.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Учебная практика, научно-исследовательская работа (получение первичных навыков научно-исследовательской работы)

Дополнительные главы химии: катализ в органической химии и технологии органических веществ

Химические средства защиты растений

Химия гетероциклических соединений

Химия циклопарафинов

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ОПК-1: Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
Знать: теоретические основы физико-химических методов исследований (УФ-, ИК-, ЯМР-спектроскопия, Масс-спектроскопия)
Уметь: пользоваться знаниями фундаментальных наук при проведении исследований, формулировать и оформлять результаты экспериментов по общепринятым правилам
Владеть: навыками подбора методов исследования, приемами формулирования и методологической оценки основных результатов научного эксперимента
ОПК-2: Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
Знать: навыками подбора методов исследования, приемами формулирования и методологической оценки основных результатов научного эксперимента
Уметь: анализировать возможности современных методов исследования, исходя из специфики конкретных задач в профессиональной деятельности
Владеть: идеологией и системой выбора инструментальных методов химического анализа, а также оценкой возможностей каждого метода, навыками работы на современной приборной технике
ОПК-4: Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
Знать: новейшие методы исследования качества продукции с использованием реферативных, периодических, справочно-информационных изданий в области теоретических и экспериментальных методов исследований
Уметь: работать с информацией в глобальных компьютерных сетях с целью поиска новых методов исследований в химической технологии
Владеть: навыками анализа и систематизации информации о теоретических и экспериментальных методах исследований в химии для принятия обоснованных технических решений в профессиональной деятельности.

3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Пр. (часы)	Лаб. (часы)			
Раздел 1. Современные методы выделения и идентификации органических соединений	2					Р,Д,Л
Тема 1. Различные виды хроматографии Различные виды хроматографии: тонкослойная, колоночная, газо-жидкостная, жидкостная и флеш для качественного и количественного анализа органических соединений. Лабораторная работа №1. Статистический анализ результатов параллельных опытов по щелочной экстракции коры хвойных пород древесины.Различные виды хроматографии (тонкослойная, колоночная, газо-жидкостная, жидкостная, флеш) для качественного и количественного анализа органических соединений.		3	4	4	ИЛ	
Тема 2. Масс-спектрометрия в органической химии Масс-спектрометрия для установления молекулярной массы и подтверждения строения органических соединений. Хромато-масс-спектрометрия для анализа смесей органических веществ. Лабораторная работа №2. Разделение смесей органических соединений хроматографическими методами. Масс- и хроматомасс-спектроскопия: нахождение связи между строением соединения и характером распада на осколочные ионы под действием электронного удара		3	7	3	ИЛ	
Тема 3. Рентгеноструктурный анализ в органической химии Рентгеноструктурный анализ для установления абсолютного строения органических соединений Лабораторная работа №3. Конформационный анализ твердых органических веществ с помощью РСА		3	5	3	ИЛ	
Раздел 2. Определение реакционной способности органических соединений						Д,Л

Тема 4. Классические теории реакционной способности органических соединений Классические теории реакционной способности органических соединений: σ-, ρ-анализ и др. Лабораторная работа №4. Приведение кинетических кривых реакций гидроперекиси пинана с дисульфидами к виду y = a + bx для определения общего порядка реакции и порядка по реагентам. Метод начальных скоростей.		2	4	2	ИЛ	
Тема 5. Современные квантово-химические расчеты Современные квантово-химические расчеты реакционной способности органических веществ, распределения электронной плотности и энергетических характеристик органических молекул. Лабораторная работа №5.Расчеты распределения электронной плотности в органических молекулах с помощью компьютерных программ		2	6	1	ГД	
Раздел 3. Планирование эксперимента и обработка экспериментальных данных						О,Л
Тема 6. Статистическая обработка экспериментальных данных Статистическая обработка экспериментальных данных, распределение Стьюдента и Пирсона. Доверительная вероятность и доверительные границы. Определение относительного стандартного отклонения выборки. Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей. Линейный регрессионный анализ, метод наименьших квадратов. Дисперсионный анализ. Корреляционный анализ, Коэффициент линейной корреляции двух исследуемых величин. Корреляции в современной химии. Лабораторная работа №6. Статистическая обработка экспериментальных данных		2	4	4	ГД	
Тема 7. Статистические методы планирования эксперимента Статистические методы планирования эксперимента. Полный факторный эксперимент. Кодирование факторов. Матрица планирования. Классические теории реакционной способности органических соединений (σ-, ρ-анализ и др.). Лабораторная работа №7. Статистические методы планирования эксперимента		2	4	4	ИЛ	

Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		17	34	21		
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)		2,5		33,5		
Всего контактная работа и СР по дисциплине		53,5		54,5		

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-1	1. Имеет четкие представления о путях саморазвития, самореализации использования творческого потенциала. 2. Использует образование для развития и реализации личности. 3. Применяет методы саморазвития и самореализации для профессионального роста.	1. Вопросы устного собеседования 2. Практико-ориентированные задания
ОПК-2	1. Ориентируется в информационном потоке сведений о развитии приоритетных и критических технологий в России. 2. Оценивает и выявляет перспективные направления развития химической технологии. 3. Применяет навыки обработки и систематизации информации о современном состоянии химической технологии.	1. Вопросы устного собеседования 2. Практико-ориентированные задания
ОПК-4	1. Имеет понятия о структуре и принципах функционирования компьютерных систем автоматизации научных исследований. 2. Способен самостоятельно анализировать информацию в области науки и техники. 3. Свободно пользуется навыками извлечения информации из различных источников, современными методами научных исследований.	1. Вопросы устного собеседования 2. Практико-ориентированные задания

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	Обучающийся показывает всестороннее и глубокое знание достаточный уровень знаний теоретических и экспериментальных методов исследования в химии, свободно ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях; усвоил основную и знаком с дополнительной литературой; проявляет творческие способности в использовании учебного материала.	Правильное решение предложенной задачи. Написаны все промежуточные и конечный продукты предложенной схемы реакций.
4 (хорошо)	Обучающийся показывает всестороннее и глубокое знание достаточный уровень знаний теоретических и экспериментальных методов исследования в химии, ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях; усвоил основную литературу.	Правильное решение предложенной задачи с несущественными ошибками. Написаны основные промежуточные и конечный продукты предложенной схемы реакций.
3 (удовлетворительно)	Обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины; недостаточно владеет теоретическими и экспериментальными методами исследования в химии; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе на	Неправильное решение задачи. Получено несколько промежуточных продуктов реакции.

	зачете существенные ошибки и не может устранить.	
2 (неудовлетворительно)	Обучающийся не имеет базовых знаний по дисциплине; не владеет теоретическими и экспериментальными методами исследования в химии; не ориентируется в основных понятиях и определениях; не знаком с основной литературой; допускает при ответе на зачете существенные ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя.	Задача не решена.

5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 2	
1	Статистическая обработка экспериментальных данных, распределение Стьюдента и Пирсона.
2	Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей. Линейный регрессионный анализ, метод наименьших квадратов. Дисперсионный анализ.
3	Представление результатов эксперимента с помощью математических моделей. Дисперсионный анализ.
4	Корреляционный анализ, Корреляции в современной химии
5	Статистические методы планирования эксперимента. Полный факторный эксперимент
6	Классические теории реакционной способности органических соединений (σ-, ρ-анализ и др.).
7	Современные квантово-химические расчеты реакционной способности органических веществ
8	Спектральные (ИК) методы исследования строения органических веществ
9	Спектральные (УФ) методы исследования строения органических веществ
10	Спектральные (ЯМР) методы исследования строения органических веществ
11	Качественный и количественный анализ органических соединений с помощью тонкослойной хроматографии
12	Качественный и количественный анализ органических соединений с помощью колоночной хроматографии
13	Качественный и количественный анализ органических соединений с помощью газо-жидкостной хроматографии
14	Качественный и количественный анализ органических соединений с помощью жидкостной хроматографии
15	Установления молекулярной массы и строения органических соединений с помощью масс-спектрометрии
16	Анализ смесей органических веществ с помощью хромато-масс-спектрометрии
17	Рентгеноструктурный анализ как метод установления строения органических соединений.

5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Задание 1.

С помощью программы “Mercury” на основании данных рентгеноструктурного анализа установить конформацию циклогексанового кольца и пространственное положение бензоилоксильного заместителя в п-ментил-пентафторбензоате.

Задание 2.

Как экспериментально отличить 2,5-диметил-1,6-гександиол от 3,4-диметил-1,6-гександиола?

5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная	+	Письменная	+	Компьютерное тестирование		Иная	

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Время на подготовку ответа по билету 30 минут.

Письменный конспект подготовки может быть использован при обязательном устном собеседовании

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Каныгина, О. Н., Четверикова, А. Г., Бердинский, В. Л.	Физические методы исследования веществ	Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ	2014	http://www.iprbookshop.ru/33663.html
Филимонова, Н. И., Величко, А. А., Фадеева, Н. Е.	Методы электронной спектроскопии	Новосибирск: Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики	2016	http://www.iprbookshop.ru/69546.html
Устынюк, Ю. А.	Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Часть 1 (вводный курс)	Москва: Техносфера	2016	https://www.iprbookshop.ru/58860.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Ярышев, Н. Г., Медведев, Ю. Н., Токарев, М. И., Бурихина, А. В., Камкин, Н. Н.	Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе	Москва: Прометей	2015	http://www.iprbookshop.ru/58227.html
Струнин, В. И., Струнина, Н. Н., Байсова, Б. Т.	Атомная спектроскопия	Омск: Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского	2013	http://www.iprbookshop.ru/24869.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. URL: http://www.iprbookshop.ru/

Электронная библиотека ВШТЭ СПБ ГУПТД [Электронный ресурс]. URL: http://nizrp.narod.ru

Электронно-библиотечная система «Айбукс» [Электронный ресурс]. URL: https://www.ibooks.ru/

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftWindows 8

MicrosoftOfficeProfessional 2013

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Б-339	Рефрактометры, весы лабораторные, приборы для определения температуры плавления , сушильный шкаф, плитки электрические, мешалки магнитные, мешалки механические, вакуумный насос, водоструйные насосы, вытяжные шкафы, испаритель роторный LABOROTA-4000, спектрофотометр СФ-2000.