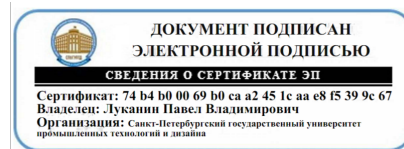


УТВЕРЖДАЮ
Директор ВШТЭ



Рабочая программа дисциплины

2.1.8.2(Ф)

Новые методы исследования органических соединений

Учебный план: ФА143.12-12_23-14.plx

Кафедра: 12 Органической химии

Научная специальность: 1.4.3. Органическая химия

Уровень образования: подготовка научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
	Лекции	Практ. занятия				
5	УП	21	42	45	3	Зачет
	РПД	21	42	45	3	
Итого	УП	21	42	45	3	
	РПД	21	42	45	3	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 № 951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)"

Составитель (и):

Доктор химических наук, заведующий кафедрой

Тришин Ю.Г.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой органической химии

Тришин Ю.Г.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Тришин Ю.Г.

Методический отдел:

Смирнова В.Г.

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: формирование у аспирантов прочных знаний о новейших методах исследования органических соединений, в частности, о

- специальных методах ядерного магнитного резонанса (двумерная спектроскопия, двойной резонанс),
- масс-спектрометрии веществ с достаточно высокой молекулярной массой и низкой летучестью (электро-спрей, MALDI-TOF и др.),
- рентгеноструктурном анализе кристаллических и аморфных (порошкообразных) веществ,
- методах исследования оптически активных веществ (дисперсия оптического вращения, круговой дихроизм, спектрополяриметрия, аномальное рассеивание рентгеновских лучей).

1.2 Задачи дисциплины:

- дать в виде лекций основной объем информации о новейших методах исследования органических соединений применительно к установлению их строения, в том числе пространственного,
- закрепить полученные знания путем контролируемых самостоятельных работ.

1.3 Место дисциплины в структуре программы аспирантуры:

Дисциплина относится к Образовательному компоненту «Дисциплины (модули)» Программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Знания и умения, полученные аспирантами при изучении данной дисциплины, необходимы при подготовке к сдаче кандидатского экзамена и написании диссертационной работы

Подготовка публикаций и (или) заявок на патенты на изобретения, полезные модели, промышленные образцы, свидетельства о государственной регистрации программ для электронных вычислительных машин, баз данных, топологий интегральных микросхем, предусмотренных абзацем четвертым пункта 5 федеральных государственных требований

Научная деятельность, направленная на подготовку диссертации к защите

Химия фосфорорганических соединений

Педагогическая практика

2 ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Знать: терминологию, относящуюся к физико-химическим методам исследования, классификацию методов; основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов

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

Владеть: навыками решения задач установления структуры соединения по данным физических методов исследования молекул.

3 СОДЕРЖАНИЕ И ПОРЯДОК ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)		
Раздел 1. Специальные методы ядерного магнитного резонанса	5				0
Тема 1. Физические основы метода ядерного магнитного резонанса. Основные характеристики спектра ядерного магнитного резонанса (число, положение, интенсивность и расщепление сигналов). Получение спектра ядерного магнитного резонанса при использовании спектрометров стационарного типа и импульсных Фурье-спектрометров.		3	4,5	5	
Тема 2. Двумерная спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Методы двойного резонанса в спектроскопии ядерного магнитного резонанса.		2	4,5	5	
Раздел 2. Масс-спектрометрия с нетрадиционными способами ионизации					0
Тема 3. Принципы масс-спектрометрии: ионизация молекул, фрагментация ионов, разделение ионов. Устройство масс-спектрометров. Методы ионизации: электронным ударом, фотоионизация, химическая ионизация, ионизация полем и др.		3	4,5	5	
Тема 4. Особое значение ионизации электро-распылением и в процессе лазерной десорбции для получения масс-спектров веществ с высокими значениями молекулярной массы и низкой летучестью. Системы ввода образцов в источник ионов. Масс-анализаторы.		1,5	4,6	5	
Раздел 3. Рентгеноструктурный анализ				0	
Тема 5. Теоретические основы рентгеноструктурного анализа. Аппаратура и оборудование для проведения рентгеноструктурного анализа монокристаллов.	1,5	4,6	5		
Тема 6. Современные методы и приборы рентгеноструктурного анализа аморфных (полукристаллических) веществ – порошковый рентгеноструктурный анализ.	1	4,6	5		
Раздел 4. Методы исследования оптически активных веществ				0	

Тема 7. Дисперсия оптического вращения (ДОВ): линейно поляризованное излучение, круговая поляризация света; симметрия молекул и оптическая активность, кривые ДОВ и эффект Коттона, принципиальная схема экспериментального определения оптического вращения.	3	4,8	5	
Тема 8. Круговой дихроизм: поглощение лучей с различной круговой поляризацией, связь кругового дихроизма и вращательной силы перехода, схема экспериментального формирования лучей с круговой поляризацией. Спектрополяриметрия: Эмпирические закономерности, реализуемые при использовании ДОВ., правила Брюстеда и октантов	3	4,8	5	
Тема 9. Аномальное рассеивание рентгеновских лучей: абсолютная конфигурация молекул в декартовой системе координат, нормальное рассеивание и закон Фриделя, аномальное рассеивание и определение абсолютной конфигурации молекул.	3	5,1	5	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	21	42	45	
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)	0			
Всего контактная работа и СР по дисциплине	63		45	

4. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

4.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

4.1.1 Показатели оценивания

Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
1. Знает терминологию, относящуюся к физико-химическим методам исследования, классификацию методов; основные понятия и законы, лежащие в основе различных методов 2. Демонстрирует связь между различными физико-химическими методами исследования, структурой и свойствами веществ; осуществить выбор соответствующего физико-химического метода исследования в зависимости от структуры вещества и поставленной задачи; использовать закономерности физико-химических процессов и физико-химические методы исследования при выполнении курсовых и работ и интерпретации экспериментальных данных; 3. Владеет навыками решения задач установления структуры соединения по данным физических методов исследования молекул. Решает любую проблему, связанную с установлением структуры соединения по данным физических методов исследования молекул.	1. Практико-ориентированные задания 2. Вопросы устного собеседования

4.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает достаточный уровень знаний, свободно ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях; усвоил основную и знаком с дополнительной литературой.	Умение решения предложенных задач в форме цепочки химических реакций. Называет все образующиеся соединения.
Не зачтено	Обучающийся не имеет достаточного	Обучающийся не может осуществить

	уровня знания дисциплины; не может описать основных свойств представителей фосфорорганических соединений; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя.	предложенных химических превращений, назвать образующиеся промежуточные соединения.
--	---	---

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

4.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 5	
1	Основы метода ядерного магнитного резонанса и важнейшие характеристики спектра ядерного магнитного резонанса.
2	Двумерная спектроскопия ядерного магнитного резонанса.
3	Методы двойного резонанса в спектроскопии ядерного магнитного резонанса.
4	Ионизация электро-распылением для получения масс-спектров веществ с высокими значениями молекулярной массы и низкой летучестью.
5	Ионизация в процессе лазерной десорбции для получения масс-спектров веществ с высокими значениями молекулярной массы и низкой летучестью.
6	Рентгеноструктурный анализ монокристаллов.
7	Порошковый рентгеноструктурный анализ.
8	Дисперсия оптического вращения как метод исследования оптически активных веществ.
9	Круговой дихроизм как метод исследования оптически активных веществ.
10	Спектрополяриметрия как метод исследования оптически активных веществ.
11	Аномальное рассеивание рентгеновских лучей как метод исследования оптически активных веществ.

4.2.2 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Охарактеризуйте условия получения и способы изображения электронных спектров.

Как выражается энергия взаимодействия ядра, обладающего ненулевым спином, с внешним магнитным полем?

Что такое спин-решеточная и спин-спиновая релаксация?

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

4.3.1 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»

4.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная + Письменная + Компьютерное тестирование Иная

4.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Время на подготовку ответа 20 минут.

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Гришаева, О. В.	Основы строения органических соединений	Кемерово: Кемеровская государственная медицинская академия	2008	http://www.iprbookshop.ru/6182.html
Бёккер, Ю.	Спектроскопия	Москва: Техносфера	2009	https://www.iprbookshop.ru/12735.html

Луков, В. В., Щербачев, И. Н.	Физические методы исследования в химии	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета	2016	http://www.iprbookshop.ru/78713.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Хребтова, С. Б., Телешев, А. Т., Ярышев, Н. Г.	Физические методы исследования вещества. Задания для самостоятельной работы студентов. Часть 1. Спектроскопия ЯМР и ЭП	Москва: Московский педагогический государственный университет	2015	https://www.iprbooksshop.ru/70160.html
Сибирцев, В. С.	Экспериментальные методы исследования физико-химических систем. Часть 2. Атомная спектроскопия	Санкт-Петербург: Университет ИТМО	2016	http://www.iprbookshop.ru/65380.html
Козицина, А. Н., Иванова, А. В., Глазырина, Ю. А., Цмокалюк, А. Н., Ивойлова, А. В., Петров, А. С., Глазыриной, Ю. А.	ЭПР-спектроскопия, электрохимические и комбинированные методы анализа	Екатеринбург: Издательство Уральского университета	2018	http://www.iprbookshop.ru/106556.html

5.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Химическая информационная сеть [Электронный ресурс]. URL: www.chemnet.ru

Химический портал [Электронный ресурс]. URL: www.chemnavigator.com

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

Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс].

URL: <http://window.edu.ru/>

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

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

5.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftWindows 8

MicrosoftOfficeProfessional 2013

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

Аудитория	Оснащение
Б-322	Приборы для определения температуры плавления, весы лабораторные, плитки электрические, мешалки магнитные, мешалки механические, микрокомпрессоры, вытяжные шкафы, водоструйные насосы, термостат, вытяжной шкаф, весы лабораторные, нагревательные плитки, ионметр, 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.
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска