

Наименование дисциплины	Физико-химические методы в тонком органическом синтезе	
Интерактивные формы обучения	Интерактивные лекции, демонстрационный эксперимент, исследовательский практикум, метод проектов и др.	
Цели освоения дисциплины		
Целями освоения дисциплины (модуля) является привитие студентам теоретических и практических знаний по основным современным физико-химическим методам установления структуры органических соединений.		
Место дисциплины в структуре ООП		
Дисциплина относится к дисциплинам Блока 1, базируется на результатах изучения дисциплин бакалавриата, в том числе органической, аналитической, общей и физической химии, квантовой химии, а также дисциплин цикла профессиональной подготовки «Теория химико-технологических процессов органического синтеза», «Химическая технология органических веществ».		
Основное содержание		
<p>Модуль 1. Общая характеристика спектроскопических методов исследования. Возникновение и развитие физических методов исследования строения органических соединений. Спектроскопические методы. Комплексное использование спектроскопических методов в целях идентификации веществ и установления их химического строения.</p> <p>Модуль 2. Масс-спектрометрия. Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.</p> <p>Модуль 3. Электронная спектроскопия. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, диеноновый хромофор, бензольный хромофор. Принцип работы спектрофотометра. Условия измерения спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по спектру поглощения.</p> <p>Модуль 4. Колебательная ИК спектроскопия. Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, COHal, NO₂, C≡N. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения.</p>		

Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область $4000 - 650 \text{ см}^{-1}$).

Модуль 5. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом $I=1/2$: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A_2 , A_X , AB и A_2B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H} . Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H} , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C .

Формируемые компетенции

- способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3).
- способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

Образовательные результаты

знать: основы методов ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса (на ядрах ^1H и ^{13}C) и масс-спектрометрии..

владеть: методиками установления строения органических соединений физико-химическими методами.

уметь: использовать методы структурного анализа органических соединений по данным УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрометрии.

Взаимосвязь дисциплины с профессиональной деятельностью выпускника

Освоение данной дисциплины как предшествующей необходимо при изучении курса «Химия и технология органических красителей», «Химия фталоцианинов», «Химия тетрабензопорфинов», «Химия макрогетероциклических соединений» и выполнении квалификационной работы.

Ответственная кафедра

Кафедра технологии тонкого органического синтеза

Начальник УМУ _____



Н.Е. Гордина