

**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ХІМІЇ ТА ЕКОЛОГІЇ
Кафедра органічної хімії**



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор

/Лендел В.Г./

2023 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Рівень вищої освіти	перший (бакалаврський) рівень
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Освітня програма	Хімія
Статус дисципліни	вибіркова
Мова навчання	українська

Ужгород 2023

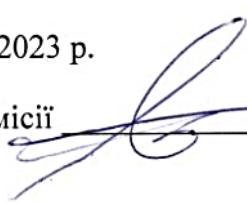
Робоча програма навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук» для здобувачів вищої освіти галузі знань **10 Природничі науки** спеціальності **102 Хімія** освітньої програми «Хімія».

Розробник: Русин І.Ф., к.х.н., доцент кафедри органічної хімії

Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри органічної хімії протокол №9 від «8» червня 2023 р.

Завідувач кафедрою  Онисько М.Ю.

Схвалено науково-методичною комісією навчально-наукового інституту хімії та екології протокол № 10 від «26» червня 2023 р.

Голова науково-методичної комісії  Сливка М.В.

© Русин І.Ф., 2023 р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 2023 р.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом
	Денна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС –4	Рік підготовки:
Загальна кількість годин – 120	4-ий
Кількість модулів –2	Семестр:
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних –5 самостійної роботи студента – 5	8 семестр
	Лекції:
	24
	Практичні (семінарські):
Вид підсумкового контролю: іспит	Лабораторні:
	36
Форма підсумкового контролю: комбінований	Самостійна робота:
	60

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук» є надання студентам, які спеціалізуються на кафедрі органічної хімії, теоретичних знань та практичних навичок в розв'язанні основних завдань щодо ідентифікації органічних сполук, дослідження особливостей їх структури за допомогою фізико-хімічних методів та вивчення взаємозв'язку між хімічною будовою та властивостями речовин. Завдання курсу полягає в тому, щоб навчити студентів самостійно обирати та вміти застосувати метод чи групу методів для дослідження будови та ідентифікації невідомої органічної речовини.

Відповідно до освітньої програми, вивчення дисципліни сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями

ФК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

ФК 3. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт виходячи із вимог хімічної метрології та професійних стандартів в галузі хімії.

ФК 7. Здатність здійснювати типові хімічні лабораторні дослідження

ФК 8. Здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані.

ФК 9. Здатність використовувати стандартне хімічне обладнання

3. ПЕРЕДУМОВИ ДЛЯ ВИВЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Передумовами вивчення навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук» є опанування таких навчальних дисциплін (НД) освітньої програми (ОП):

Шифр НД за ОП: ОК 11. Неорганічна хімія (ОП бакалавр 102 Хімія)

ОК 12. Аналітична хімія (ОП бакалавр 102 Хімія)

ОК 15 Фізичні методи дослідження (ОП бакалавр 102 Хімія)

ОК 17 Органічна хімія (ОП бакалавр 102 Хімія)

ОК 18 Фізична хімія (ОП бакалавр 102 Хімія)

4. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньої програми «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук», вивчення навчальної дисципліни повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Розуміти ключові хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.	ПРН 1
Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	ПРН 5
Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.	ПРН 8

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук»:

Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
Розуміти теоретичні основи та принципи фізико-хімічних методів для їх практичного застосування при дослідженні будови органічних сполук.	ПРН 1
Обирати та вміти застосувати метод чи групу методів для дослідження будови та ідентифікації органічних сполук відповідно до їх властивостей.	ПРН 5
Вміти реалізовувати та інтерпретувати експериментально отримані результати дослідження органічних речовин фізико-хімічними методами	ПРН 8

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є: усні відповіді, виконання тестових та розрахункових завдань, виконання лабораторних робіт, написання контрольних робіт, іспит.

Поточне оцінювання рівня засвоєння теми здійснюється на кожному лабораторно-практичному занятті. Рейтингова оцінка формується на основі поточних оцінок та результатів виконання модульної контрольної роботи. Підсумкова оцінка за дисципліну може дорівнювати рейтинговій або ж встановлюватись за підсумками складання заліку.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю: проведення колоквиумів, виконання та захист лабораторних робіт

Форма модульного контролю: письмова контрольна робота

Форма підсумкового семестрового контролю: іспит

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 1)

Поточне оцінювання та самостійна робота					Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	T5	50	100
10	10	10	10	10		

T1, T2... – теми

Розподіл балів, які отримують здобувачі вищої освіти (модуль 2)

Поточне оцінювання та самостійна робота					Модульна контрольна робота	Сума
T1	T2	T3	T4	T5	50	100
10	10	10	10	10		

T1, T2... – теми

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Оцінювання знань студентів з навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук» здійснюється на основі результатів поточного та підсумкового контролю.

Об'єктом оцінювання знань студентів є програмний матеріал навчальної дисципліни «Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук».

Поточний контроль здійснюється під час проведення лабораторно-практичних занять і має на меті перевірку рівня підготовки студентів.

Завданням поточного контролю є перевірка розуміння та засвоєння лекційного матеріалу, набуття практичних навичок при розв'язуванні завдань, уміння самостійно опрацьовувати теоретичний матеріал, висловлювати та обґрунтовувати власні думки, проводити презентацію опрацьованого матеріалу, самостійно виконувати дослідження.

Результати поточного оцінювання роботи студентів вносяться у журнал обліку роботи викладача.

Об'єктами поточного контролю знань студентів є:

- активність та результативність роботи на лабораторно-практичних заняттях;
- виконання завдань для самостійного опрацювання;
- виконання індивідуальних завдань;
- виконання модульної контрольної роботи.

До модульної контрольної роботи допускаються студенти, які відвідали не менше 50% аудиторних занять і отримали не менше 35% від можливої кількості балів за поточну роботу.

Модульна контрольна робота проводиться в письмовій формі шляхом виконання індивідуального варіанту завдання. Типовий варіант завдання модульної контрольної роботи містить:

$$\begin{aligned} 2 \text{ тестові завдання (5 балів кожне)} &= 10\text{б.} \\ 2 \text{ теоретичні питання (10 балів кожне)} &= 20 \text{ б.} \\ 2 \text{ практичні завдання (10 балів кожне)} &= 20 \text{ б.} \\ \text{Сумарно} &= 50 \text{ б.} \end{aligned}$$

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Завданням підсумкового контролю (вспиту) є перевірка розуміння студентами програмного матеріалу в цілому, здатності логічно та послідовно розв'язувати практичні задачі, творчо використовувати накопичені знання, представляти та описувати одержані результати.

Ті студенти, які за результатами поточного контролю отримали 35% і більше від максимально можливої кількості балів, допускаються до іспиту.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	A	відмінно
82-89	B	добре
74-81	C	
64-73	D	задовільно
60-63	E	
35-59	FX	незадовільно з можливістю повторного складання
0-34	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

За результатами контролю знань студентів, дозволяється виставлення екзаменаційної оцінки – «відмінно», «добре», та «задовільно». Студент має право підвищити оцінку, складаючи іспит. Оцінки FX, F («незадовільно») виставляються студентам, яким не зараховано хоча б один модуль з дисципліни після завершення її вивчення.

Студенту з оцінкою FX дозволяється скласти підсумковий семестровий контроль. У випадку повторного одержання ним незадовільної оцінки, студент має право на повторне складання підсумкового контролю (іспиту) не більше 2-х разів, згідно затвердженого графіка.

Студенти, які одержали оцінку F по завершенню вивчення дисципліни (не виконали навчальну програму хоча б з одного модуля, або не набрали за поточну навчальну діяльність з модуля мінімальну кількість балів), повинні пройти повторне навчання за індивідуальним навчальним планом.

6. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

6.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1. Хроматографічні методи дослідження. Мас-спектрометрія та хромато-мас-спектрометрія.

Тема 1. Загальна характеристика хроматографічних методів.

Основні особливості хроматографічного процесу. Визначення хроматографії, історія її виникнення. Класифікація методів хроматографії. Основні поняття хроматографії (фази, сорбенти, елюенти, хроматограма, розподіл, адсорбція). Адсорбенти та розчинники, що використовуються в хроматографії; вимоги до них. Області застосування хроматографії.

Тема 2. Газова хроматографія. Газо-рідинна хроматографія.

Газова хроматографія як метод фізико-хімічного дослідження. Якісний газо-хроматографічний аналіз. Кількісний газо-хроматографічний аналіз. Газо-рідинна хроматографія. Препаративна ГРХ. Основна апаратура. Класифікація хроматографів. Лабораторні хроматографи.

Тема 3. Рідинна хроматографія. Планарна хроматографія.

Колонкова рідинна хроматографія низького тиску. Особливості, недоліки, використання. Нерухомі та рухомі фази. Види, правила вибору. Високоєфективна рідинна хроматографія.

Апаратура, сорбенти, рухомі фази методів планарної хроматографії, ТШХ. Техніка одержання хроматограм. Якісний аналіз. Фактори утримування. Методи кількісного планарного хроматографічного аналізу. Проявники в методі планарної хроматографії. Вибір фаз у методах ТШХ та планарної хроматографії.

Тема 4. Загальна характеристика методу мас-спектрометрії. Хромато-мас-спектрометрія.

Основні принципи та фізичні основи мас-спектрометрії. Методи іонізації органічних молекул. Типи іонів, що фіксуються в мас-спектрі. Визначення бруто-формули виходячи з даних мас-спектрометрії. Закономірності утворення молекулярних, фрагментних та перегрупованих іонів. Хромато-мас-спектрометрія.

Тема 5. Основні закономірності фрагментації молекулярного йону. Інтерпретація мас-спектрів органічних сполук.

Умови та основні шляхи фрагментації молекулярного йону. Особливості мас спектрів аліфатичних сполук, олефінів і ацетиленів, ароматичних і жирно-ароматичних вуглеводнів, спиртів, амінів, карбонільних сполук, кислот та естерів, галогенопохідних. Основні правила мас-спектрометрії.

Модуль 2. Молекулярна спектроскопія. ІЧ спектроскопія. ЯМР спектроскопія.

Тема 6. Молекулярна абсорбційна спектроскопія. Теоретичні основи

Природа світла. Взаємодія речовини з електромагнітним випромінюванням. Електромагнітний спектр, його хвильова і енергетична характеристики. Діапазони електромагнітного випромінювання. Природа взаємодії випромінювання з речовинами в залежності від довжини хвилі і енергії випромінювання. Основні закони світлопоглинання: закон Бугера-Ламберта, закон Бера, об'єднаний закон Бугера-Ламберта-Бера. Умови виконання основного закону світлопоглинання. Причини відхилення від закону Бугера-Ламберта-Бера (характеристика поведінки речовини в розчині: асоціація, дисоціація, комплексоутворення, взаємодія з розчинниками, взаємодія поглинаючих речовин між собою).

Тема 7. Електронні спектри органічних сполук. Застосування фотоколориметрії та спектрофотометрії для дослідження органічних сполук.

Експериментальна перевірка закону Бугера-Ламберта-Бера. Умови виконання закону Бугера-Ламберта-Бера в залежності від області спектру. Природа електронних спектрів. Типи переходів: $\sigma\text{-}\sigma^*$, $n\text{-}\sigma^*$, $n\text{-}\pi^*$, $\pi\text{-}\pi^*$. Правила відбору. Смуги переносу заряду.

Поглинання ненасичених вуглеводнів та їх похідних. Поглинання молекул, які містять ізольовані кратні зв'язки: $C=C$, $C=O$, $N=N$, $C\equiv C$, $C\equiv N$, $C=N$, $N=O$, NO_2 , $C=S$ та ін. Вплив спряження на спектри поглинання. Спектри поглинання спряжених полієнових систем. Правило Вудворда для визначення довжини хвилі, максимуму поглинання заміщених дієнів. Поглинання спряжених карбонільних сполук. Правило Вудворда для визначення довжини хвилі максимуму поглинання заміщених ненасичених кетонів. Поглинання азотистих похідних карбонільних сполук і використання його для визначення структури карбонільних сполук.

Тема 8. Загальна характеристика та теоретичні основи методу ІЧ спектроскопії.

Природа коливальних спектрів. Інфрачервоні спектри і спектри комбінаційного розсіювання світла. Поняття про типи коливань. Фактори, які визначають положення й інтенсивність смуг поглинання. Число смуг у спектрі. Зв'язок коливальних спектрів з будовою органічних сполук. Характеристичні частоти. Основні області ІЧ спектру. Інтерпретація ІЧ спектрів органічних сполук.

Тема 9. Застосування методу ІЧ спектроскопії для дослідження органічних сполук. Валентні і деформаційні коливання $C-H$. Інфрачервоні спектри циклопарафінів. Олефінові вуглеводні. Валентні коливання $C=C$ і $C-H$. Деформаційні коливання $C-H$ зв'язків. Відмінності в ІЧ спектрах цис- і транс- ізомерів. ІЧ спектри ацетиленових вуглеводнів. Валентні коливання $C\equiv C$ і $H-C\equiv$ зв'язків. Поглинання, характерне для ароматичного ядра бензену. Використання поглинання в області $900\text{-}700\text{ см}^{-1}$ для визначення характеру заміщення ароматичних сполук.

Характерне поглинання OH групи. Водневий зв'язок, внутрішньо- і міжмолекулярний зв'язок, їх прояв в ІЧ спектрі. Поглинання, яке відповідає карбонільній групі. Поглинання $C=O$ групи в альдегідах і кетонах, карбонових кислотах та їх похідних. Зміни поглинання $C=O$ групи в наслідок внутрішньомолекулярних і міжмолекулярних взаємодій. ІЧ спектри органічних сполук Нітрогену. Області поглинання аміногрупи. Валентні коливання $N-H$. Вільні і зв'язані $N-H$ групи. Деформаційні коливання $N-H$. Нітрильна і азометинова групи. Валентні коливання $C\equiv N$, $-C=N$ груп.

Тема 10. Теоретичні основи спектроскопії ядерного магнітного резонансу.

Місце ЯМР у ряді інших спектроскопічних методів: ЯМР як один з методів спектрального аналізу, діапазон частот. Фізичні основи методу. Рівні енергії, умови резонансу. Магнітний момент ядра, гіромагнітне відношення. Зв'язок між значенням спіну ядра і наявністю магнітного і електромагнітного квадрупольного моментів ядра. Умови резонансу для ізольованого ядра.

Тема 11. Основні характеристики сигналів в ЯМР спектрах органічних сполук

Хімічний зсув. Природа хімічного зсуву. Одиниці хімічного зсуву: шкала τ , шкала δ . Хімічний зсув метильних, метиленових і метинових протонів в залежності від структури молекули.

Хімічний зсув протонів ароматичних сполук, протонів при ненасичених зв'язках, альдегідних протонів. Особливості хімічного зсуву протонів гідроксильної і аміногруп.

Інтегральна інтенсивність. Спін-спінова взаємодія. Константа спін-спінової взаємодії. Гемінальні, віцинальні КССВ.

Тема 12. Застосування спектроскопії ЯМР для дослідження структури органічних сполук

Мультиплетність спектрів. Складні спін-спінові взаємодії. Спектри першого порядку. Спектри вищого порядку. Ядерний ефект Оверхаузера. Кореляційна спектроскопія, COSY, NOESY, гетероядерна кореляція.

6.2. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання:					
	Усього	у тому числі				
лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота	
Модуль 1						
Тема 1. Загальна характеристика хроматографічних методів.		2		2		6
Тема 2. Газова хроматографія. Газо-рідинна хроматографія.		2		2		6
Тема 3. Рідинна хроматографія. Планарна хроматографія.		2		4		6
Тема 4. Загальна характеристика методу мас-спектрометрії. Хромато-мас-спектрометрія.		2		4		6
Тема 5. Інтерпретація мас-спектрів органічних сполук.		2		4		6
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	56	10		16		30
Модуль 2						
Тема 6. Молекулярна абсорбційна спектроскопія.		2		4		6
Тема 7. Електронні спектри органічних сполук.		2		4		
Тема 8. Загальна характеристика та теоретичні основи методу ІЧ спектроскопії.		2				6
Тема 9. Застосування методу ІЧ спектроскопії для дослідження органічних сполук.		2		4		6
Тема 10. Теоретичні основи спектроскопії ядерного магнітного резонансу.		2				
Тема 11. Основні характеристики сигналів в ЯМР спектрах органічних сполук		2		4		6
Тема 12. Застосування спектроскопії ЯМР для дослідження структури органічних сполук		2		4		6
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	64	14		20		30
Разом за семестр	120	24		36		60

6.3. Теми лабораторно-практичних робіт

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Тонкошарова хроматографія	4
2	Розділення суміші органічних сполук методом колонкової хроматографії	4
3	Встановлення будови молекул вуглеводнів за їх мас-спектрами.	4
4	Встановлення будови молекул спиртів, амінів, карбонільних сполук, галогенопохідних за їх мас-спектрами.	4
5	Кількісне визначення фенолу фотометричним методом.	4
6	Спектрофотометричне дослідження органічних сполук.	4
7	Структурний аналіз на основі ІЧ спектрів органічних сполук	4
8	Встановлення структури органічних сполук за даними спектрів ЯМР ^1H . Аналіз спінових систем, визначення КССВ.	4
9	Інтерпретація спектрів ЯМР ^{13}C . і структурний аналіз органічних сполук.	4
Разом		36

6.4. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Класифікація хроматографічних методів.	6
2	Апаратурне оформлення газової та рідинної хроматографії.	6
3	Проявники та розчинники в хроматографії. Елюотропні ряди.	6
4	Основні правила мас-спектрометрії.	6
5	Методи іонізації, методи розподілу та реєстрації іонів.	6
6	Апаратура та принципи вимірювання у фотометричному аналізі. Оптичні схеми та принципи роботи приладів для спектрофотометрії та фотоколориметрії.	6
7	Теорія коливальних спектрів. Зв'язок ІЧ спектрів з будовою органічних сполук.	6
8	Коливання багатоатомних молекул. Вироджені коливання.	6
9	Принципи реєстрації сигналу ЯМР. Блок-схема спектрометра ЯМР	6
10	Номенклатура спінових систем.	6
Разом		60

8. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

Основна література

1. Фізичні методи дослідження в хімії: навчальний посібник для самостійної роботи / уклад.: М. М. Олійник, М. В. Горічко, О. М. Швед та ін. – Вінниця: ДонНУ, 2015. – 198 с.
2. Мінаєва В. О. Хроматографічний аналіз: Підручник для студентів вищих навчальних закладів. – Черкаси: Вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2013. – 284 с.
3. Ю.М. Воловенко, О.В. Туров. Ядерний магнітний резонанс. / К.; Ірпінь: ВТФ «Перун», 2007. – 480с
4. Зінчук В.К. Фізико-хімічні методи аналізу / В.К. Зінчук, Г.Д. Левицька, Л.О. Дубенська. – Львів: ЛНУ, 2008.
5. Фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук. Методичний посібник до лабораторного практикуму / М.В.Сливка, М.Ю.Онисько, А.О.Кривов'яз, В.Г.Лендел. – Ужгород: ВАТ «Патент», 2010.- 40 с.

Електронні ресурси

1. Навчальні матеріали до дисципліни на сайті електронного навчання УжНУ:
<https://e-learn.uzhnu.edu.ua/>
2. [ukrayinska.libretexts.org/Хімія/Органічна_хімія/Органічна_хімія_з_біологічним_акцентом_\(Soderberg\)/04%3A_Визначення_структури_I_UV-is_та_інфрачервона_спектроскопія%2C_мас-спектрометрія](http://ukrayinska.libretexts.org/Хімія/Органічна_хімія/Органічна_хімія_з_біологічним_акцентом_(Soderberg)/04%3A_Визначення_структури_I_UV-is_та_інфрачервона_спектроскопія%2C_мас-спектрометрія)

Додаток 2

Результати перегляду робочої програми навчальної дисципліни

Робоча програма перезатверджена на 20__ / 20__ н.р. без змін; зі змінами (Додаток __).
(потрібне підкреслити)

протокол № __ від «__» _____ 20__ р. Завідувач кафедри _____
(підпис) (Прізвище ініціали)