

ЕЛЕЦКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. И.А. БУНИНА

«УТВЕРЖДАЮ»
И.о. декана медицинского факультета
И.О. Феклина/



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.01.02 Теоретические и экспериментальные методы в химии

Направление подготовки: 04.04.01 Химия

Направленность (профиль): Трансляционная химия и биохимические технологии

Квалификация (степень): *магистр*

Форма обучения: *очная*

Факультет: Медицинский

Кафедра: Химико-биологических дисциплин и фармакологии

	очная форма	очно-заочная форма	заочная форма
Курс	2		
Семестр/триместр	3,4		

Лекции	16		
Лабораторные занятия			
Практические (семинарские) занятия	20		
Консультации			
Форма(ы) промежуточной аттестации	Зачет с оценкой (3 семестр) Экзамен – 0,3 (4 семестр)		
Контроль	9		
Иные формы работы			
Самостоятельная работа	422,7		

Всего часов: 468

Трудоемкость: 13 зачетных единиц

Разработчик(и) рабочей программы: д.х.н., проф. Мокшина Н.Я.

I. ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

Цель изучения дисциплины: приобретение магистрами знаний по основам современных теоретических и экспериментальных методов исследования химических процессов в соответствии с квалификационными требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования.

Задачи изучения дисциплины:

- сформировать навыки работы в химической лаборатории, работы с химической посудой, оборудованием и реактивами;
- сформировать навыки практических и теоретических знаний в области химических, спектральных, оптических, электрохимических и кинетических методов анализа, методов разделения, концентрирования, определения состава, структуры вещества, а также на развитие навыков проведения исследований с помощью современных физических и физико-химических методов на современном оборудовании для решения актуальных экспериментальных задач.

Место дисциплины в структуре ОПОП: реализуется в рамках части, формируемой участниками образовательных отношений, блока Б1. Дисциплины (модули).

Планируемые результаты обучения по дисциплине:

Код компетенции	Индикаторы достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПКС-1 Способен проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования, владеть теорией и навыками	Знать: - методы выбора и цели направления научного исследования, методы сбора и анализа литературных данных по заданной тематике научных исследований; - принципы работы современных химических приборов, теоретические основы химических, физических, физико-химических методов анализа; - важнейшие теоретические представления химии и смежных наук;	Знает: — современные методы теоретического и экспериментального исследования в различных разделах химии, методы определения состава, структуры вещества, механизма химических процессов, их теоретические основы, возможности и границы применимости

практической работы в выбранной области химии и смежных наук с применением современной аппаратуры и получать новые научные и прикладные результаты	- методы обобщения и представления результатов научного исследования.	
	Уметь: - разрабатывать стратегию научных исследований, составлять общий план и детальные планы отдельных стадий; - содержательно и логически грамотно излагать результаты эмпирического исследования, обосновывать выводы эмпирического исследования, оперировать научной терминологией; - выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов; - использовать на практике умения в организации научно-исследовательской работы и работы в научном коллективе, способности реализовывать новые идеи и проекты.	Умеет: – осуществлять методологическое обоснование научного исследования; – анализировать, оценивать и прогнозировать экономические эффекты и последствия реализуемой и планируемой деятельности; – выбрать метод исследования для заданной научной и технологической задачи, спланировать и провести экспериментальное исследование, провести интерпретацию результатов исследования;
	Владеть: - навыками использования современного физико-химического оборудования для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования;	Владеет: - навыками использования современного физико-химического оборудования для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования;

	- навыками комментирования, реферирования и обобщения результатов научных исследований и разработок; - опытом публичного выступления и участия в представлении результатов научно-исследовательской работы.	- методиками проведения исследований с помощью современных физических и физико-химических методов. - навыками комментирования, реферирования и обобщения результатов научных исследований и разработок; - опытом публичного выступления и участия в представлении
--	--	---

II. СОДЕРЖАНИЕ И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ
с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу

Очная форма обучения

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего	Аудиторные занятия			Сам. раб.
			ЛК	ПЗ	ЛБ	
	Раздел 1. Строение вещества	110	6			104
1	Тема 1. Корпускулярно-волновое описание движения электрона в атоме. Квантовые числа	28	2			26
2	Тема 2 Волновая теория строения атома. Метод молекулярных орбиталей. Орбитально-дефицитные электронно-избыточные соединения	28	2			26
3	Тема 3 Современные теории химических связей	28	2			26
4	Тема 4 Межмолекулярные силы Ван-дер-Ваальса	28		2		26
	Раздел 2. Элементы термодинамики	84	2	4		78
5	Тема 5 Первый закон термодинамики	28	2			26

6	Тема 6 Закон Гесса и его следствия	28		2		26
7	Тема 7 Смещение химического равновесия. Принцип Ле Шателье	28		2		26
	Раздел 3. Растворы	56		4		52
8	Тема 8 Основные характеристики растворов и других дисперсных систем	28		2		26
9	Тема 9 Свойства растворов электролитов и неэлектролитов	28		2		26
	<i>Форма отчетности Зачет с оценкой</i>					
	<i>Итого за 3 семестр</i>	252	8	10		234
	Раздел 4. Теоретические и экспериментальные методы в химии.	206,7	8	10		188,7
10	Тема 10. ИК-спектроскопия. УФ-спектроскопия	40	2	2		36
11	Тема 11. ЯМР-спектроскопия. Масс-спектроскопия. Хроматографические методы.	40	2	2		36
12	Тема 12. Экспериментальные методы исследования процессов окисления органических веществ.	40	2	2		36
13	Тема 13. Возможный механизм химического процесса и его термохимический анализ.	40	2	2		36
14	Тема 14. Математический анализ кинетики жидкофазного окисления органических веществ.	46,7		2		44,7
	<i>Контроль</i>	9				
	<i>Форма отчетности Экзамен (4 семестр)</i>	0,3				
	<i>Итого за 4 семестр</i>	216	8	10		188,7
	ИТОГО	468	16	20		422,7

Очно-заочная форма обучения

не реализуется

Заочная форма обучения

не реализуется

III. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Текущая аттестация проводится в форме контрольной работы (в традиционной или тестовой форме).

Типовой вариант контрольной работы

В традиционной форме:

1. Объясните, почему алканы часто используются в качестве растворителей при съемке УФ-спектров других соединений.
2. В УФ-спектрах этилена, пропилена, цис-2-бутена и транс-2-бутена наблюдаются интенсивные полосы поглощения, соответствующие $\pi \rightarrow \pi^*$ переходу при $\lambda_{\text{макс}} = 175, 177, 163$ и 173 нм. Какая полоса соответствует какому алкену?
3. Соединение C_5H_8 при каталитическом дегидрировании превращается в н-пентан. УФ-спектр этого соединения характеризуется наличием интенсивной полосы поглощения при $\lambda_{\text{макс}} = 220$ нм ($\epsilon = 22000$). Какое заключение можно сделать о строении углеводорода C_5H_8 ?
4. В какой области УФ-спектра наблюдается поглощение, обусловленное переходом $\pi \rightarrow \pi^*$, у следующих соединений: а) ацетилен; б) изопропилацетилен; в) метил-третбутилацетилен; г) винилацетилен? Можно ли применять метод УФ-спектроскопии для идентификации ацетиленовых углеводородов?

В тестовой форме:

1. ИК – спектроскопия...

- а) основана на поглощении молекулами ИК – излучения;
- б) предполагает исследования молекулярных колебаний;
- в) позволяет исследовать O_2 , N_2 , H_2 ;
- г) использует электромагнитные излучения видимого диапазона.

2. УФ - спектроскопия...

- а) исследует переходы валентных электронов;
- б) основана на поглощении молекулами УФ – излучения;
- в) основана на испускании молекулами УФ – излучения;
- г) основана на взаимодействии атомов с УФ – излучением.

3. Метод ЯМР...

- а) используют для анализа веществ, атомы которых имеют ядра с нечётным количеством протонов;
- б) основан на взаимодействии ядер атомов с постоянным магнитным полем;
- в) позволяет измерять оптическую активность веществ;
- г) основан на анализе спектров люминесценции веществ в процессе ЯМР.

4. Самым чувствительным методом анализа является...

- а) масс-спектрометрия;
- б) лазерная спектроскопия;
- в) атомно-абсорбционная спектроскопия;
- г) радиофизический.

5. Молекулы O₂, Cl₂ неактивны в ИК-спектре потому, что...

- а) отсутствуют валентные колебания;
- б) отсутствуют свободные орбитали для перехода электронов;
- в) дипольный момент равен нулю;
- г) отсутствуют группы симметрии.

6. Предел обнаружения в спектрофотометрии составляет:

- а) 10^{-5} ;
- б) 10^{-7} ;
- в) 10^{-9} ;
- г) 10^{-11} .

7. По расположению неподвижной фазы тонкослойная хроматография относится к:

- а) Плоскостной;
- б) Колоночной;
- в) Приборной;
- г) Лигандообменной.

8. Для исследования методом вторичной ионной масс-спектрометрии достаточен вакуум:

- а) 10^{-2} Па;
- б) 10^{-8} Па;
- в) 10^{-4} торр;
- г) 30 нм.

9. Материалы в виде твердых тел, размеры которых в одном, двух или трех пространственных координатах называют наноматериалами если они не превышают:

- а) 1 нм;
- б) 20 нм;

- в) 100 нм;
- г) 500 нм.

10. К колоночной хроматографии относятся:

- а) Тонкослойная хроматография;
- б) Газо-жидкостная хроматография;
- в) Сверхвысокоэффективная жидкостная хроматография;
- г) Высокоэффективная жидкостная хроматография;
- д) Бумажная хроматография.

11. Установите соответствие между взаимодействующими веществами и механизмом протекания реакции:

ВЕЩЕСТВА

- А) 2-хлорбутан с аммиаком;
- Б) хлорэтан с водным раствором;
- В) полимеризация изопрена (2-метилбутен-1);
- Г) пропиен с водой;
- Д) этаналь с метанолом;
- Е) этилбензол с азотной кислотой;

МЕХАНИЗМ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ

- 1) радикальное замещение;
- 2) радикальное присоединение гидроксида натрия;
- 3) нуклеофильное замещение;
- 4) нуклеофильное присоединение;
- 5) электрофильное присоединение;
- 6) электрофильное замещение.

Запишите в ответ цифры, расположив их в порядке, соответствующим буквам:

А	Б	В	Г	Д	Е

12. Отметьте цифрами верные и неверные высказывания относительно метода К. Фишера:

- А. Применим для малых навесок субстанций;
- Б. Легкая пробоподготовка ;
- В. Малое время анализа;
- Г. Наиболее точно определяется содержание влаги в субстанциях, реагирующих с реактивом К. Фишера (сульфиды, меркаптаны и т.д.);
- Д. Пригоден для автоматизации;
- Е. Можно анализировать твердые вещества, жидкости и газы;
- Ж. Можно проводить без контрольного опыта.

1. Верное высказывание.
2. Неверное высказывание.

Промежуточная аттестация обучающихся осуществляется в форме зачета с оценкой, экзамена с использованием следующих оценочных материалов: *перечень вопросов к зачету с оценкой, перечень вопросов к экзамену.*

Вопросы к зачету с оценкой (3 семестр, очная форма обучения)

- 1 Основные законы и понятия химии. Закон сохранения энергии, закон сохранения массы. Закон стехиометрии, закон эквивалентов, закон постоянства состава, закон кратных отношений. Эквивалент. Фактор эквивалентности. Моль. Молярная масса эквивалента. Газовые законы.
- 2 Основные классы неорганических соединений, гомо- и гетеросоединения. Оксиды и гидроксиды. Классификация, свойства и получение.
- 3 Взаимосвязь основных классов неорганических соединений. Способы получения солей.
- 4 Соли, классификация, свойства. Кислые и основные соли, получение, свойства.
- 5 Теплота и работа. Энтальпия. Термохимические уравнения. Закон Гесса следствие из него.
- 6 Фазовые и химические превращения. Примеры применения закона Гесса для вычисления изменения энтальпии в различных процессах.
- 7 Простое вещество. Стандартное состояние. Стандартная энтальпия образования соединений из простых веществ. Стандартная энтальпия образования ионов, относительный характер значений энтальпии образования ионов.
- 8 Энтропия, единицы измерения энтропии. Уравнение Больцмана. Стандартная энтропия. Изменение энтропии при химических и фазовых превращениях. Расчет изменения энтропии различных процессов
- 9 Понятие об энергии Гиббса. Энергия Гиббса как критерий термодинамической вероятности протекания реакций.
- 10 Представление о химической термодинамике. Термодинамический анализ различных процессов.
- 11 Расчет ΔH_{0298} , ΔS_{0298} с использованием таблиц стандартных термодинамических величин.
- 12 Обратимые и необратимые реакции. Химическое равновесие, характеристика Состояния химического равновесия. Закон действующих масс. Константа равновесия в гомогенных и гетерогенных процессах.
- 13 Связь ΔG_{0298} с константой равновесия. Вычисление констант равновесия при различных температурах. Изменение стандартной энергии Гиббса как количественная мера глубины и направления химической реакции.
- 14 Влияние изменения внешних условий (концентраций, общего давления, температуры) на положение химического равновесия, смещение химического равновесия. Принцип Ле-Шателье и его значение в химии.

- 15 Скорость химических реакций. Понятие об активированном комплексе. Энергия активации. Уравнение Аррениуса. Факторы, от которых зависит скорость химических реакций.
- 16 Растворы. Классификация двухкомпонентных растворов. Процессы, сопровождающие образование растворов. Сольватация и гидратация.
- 17 Различные способы выражения концентрации растворов и их взаимные пересчеты.
- 18 Коллигативные свойства разбавленных растворов. Тоноскопический закон Рауля.
- 19 Диаграмма состояния воды. Понижение давления пара над раствором. Эбулиоскопический и криоскопический законы Рауля.
- 20 Теория электролитической диссоциации Аррениуса. Роль растворителя в процессе распада электролита на ионы.
- 21 Сильные и слабые электролиты. Степень диссоциации. Зависимость степени диссоциации электролита от концентрации раствора и температуры.
- 22 Кажущаяся степень диссоциации сильных электролитов. Понятие об активности.
- 23 Ступенчатая диссоциация. Влияние одноименного иона на процесс диссоциации слабого электролита.
- 24 Применение закона действующих масс к растворам слабых электролитов. Константа диссоциации слабых электролитов. Закон разбавления Оствальда.
- 25 Ионно-молекулярные уравнения реакций. Условия смещения ионного равновесия.
- 26 Изотонический коэффициент Вант-Гоффа и его связь со степенью диссоциации электролитов.
- 27 Современные теории кислот и оснований (Брэнстеда, Льюиса, сольватосистем).
- 28 Электролитическая диссоциация молекул воды.
- 29 Комплексные соединения. Лиганды. Основные типы комплексных соединений. Номенклатура комплексных соединений.
- 30 Насыщенные и ненасыщенные растворы. Применение закона действующих масс к Равновесию в насыщенных растворах малорастворимых электролитов.
- 33 Растворимость. Расчет концентраций ионов малорастворимого электролита в его насыщенном растворе. Влияние одноименных ионов на растворимость малорастворимых электролитов.
- 34 Константа гидролиза. Связь между степенью гидролиза, константой гидролиза и концентрацией раствора.
- 35 Ступенчатый гидролиз. Расчет pH растворов солей, подвергающихся гидролизу.
- 36 Влияние присутствия одноименного иона на процесс гидролиза. Совместный гидролиз двух солей.
- 37 Исходные представления квантовой механики. Квантовый характер излучения и поглощения энергии. Уравнение Планка. Уравнение Де-Бройля, принцип неопределенности Гейзенберга.
- 38 Двойственная природа света. Корпускулярно-волновой дуализм. Уравнение Де-Бройля. Исходные представления квантовой механики.
39. Уравнение Шредингера. Физический смысл величины ψ .

40 Квантовые числа. Порядок заполнения электронных уровней и подуровней в атоме.

Вопросы к экзамену (4 семестр, очная форма обучения)

1. ИК-спектроскопия. Принцип ИК-спектроскопии. ИК-спектр. Интерпретация спектров. Методы подготовки образцов. ИК-спектроскопия отражения. Внешнее отражение в ИК-спектроскопии. Фотоакустическая детекция. ИК-микроскопия. Совместное применение аналитических методов. Перспективы развития ИК-спектроскопии.
2. УФ-спектроскопия. Классификация электронных переходов. Принцип Франка-Кондона. Теоретический расчет электронных переходов. Разрешенные и запрещенные переходы. Принцип измерения. Измерение спектра. Измерение по принципу двойной длины волн. Разностные спектры. Производные спектры. Требования к современному спектрометру. Перспективы развития УФ-спектроскопии.
3. Масс-спектрометрия. Теоретические основы метода. Природа масс-спектра. Образование ионов. Масс-спектрометры. Перспективы развития масс-спектрометрии.
4. ЯМР-спектроскопия. Теоретические основы ЯМР-спектроскопии. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Регистрация ЯМР-спектров. ЯМР-спектрометры. Техника двойного резонанса. Двухмерная ЯМР-спектроскопия. Ядерный эффект Оверхаузера. Перспективы развития ЯМР-спектроскопии.
5. Хроматографические методы. Газо-жидкостная хроматография (ГЖХ). Количественный анализ с использованием метода ГЖХ. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Жидкостно-адсорбционная хроматография. Жидкостная-жидкостная (распределительная) хроматография. Тонкослойная хроматография. Основные правила идентификации с помощью ТСХ-анализа. Методы визуализации хроматографической картины. Препаративная колоночная хроматография.
6. Реакторы и установки. Реакторы периодического действия. Установки с реакторами периодического действия для измерения поглощения кислорода. Реактор и газометрическая установка для изучения гетерогенно-каталитических реакций окисления. Реактор идеального смешения.
7. Аналитические методы. Хроматография. Анализ ненасыщенных соединений.
8. Кинетические методы. Метод открытых систем. Изотопные методы. Метод ингибиторов.
9. Физические методы. Инфракрасная спектроскопия. Люминесцентный анализ. Метод хемилюминесценции. Электронный парамагнитный резонанс. Ядерный магнитный резонанс. Метод химической поляризации ядер. Метод прерывистого освещения. Метод фотохимического последействия. Импульсный фотолит.
10. Элементы, необходимые для составления возможного механизма. Набор частиц. Химические реакции и превращения.

11. Методы составления возможного механизма. Комбинаторное составление возможного механизма с помощью компьютеров. Термохимический кинетический анализ возможного механизма, составленного комбинаторным методом.
12. Возможный механизм окисления этилбензола. Частицы, участвующие в процессе окисления. Составление возможного механизма при эвристическом подходе. Составление возможного механизма комбинаторным методом.
13. Общие кинетические уравнения жидкофазного окисления углеводородов. Различные типы экспериментальных кинетических закономерностей в процессах окисления. Кинетическое описание начальных стадий окисления этилбензола.

IV. ПЕРЕЧЕНЬ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Основная литература

- 1 Тагашева, Р. Г. Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии: практикум : учебное пособие / Р. Г. Тагашева, А. Г. Сафиулина. — Казань : КНИТУ, 2022. — 128 с. — ISBN 978-5-7882-3140-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/331004> — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4.2. Дополнительная литература

- 1 Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии : учебное пособие : в 3 частях / А. В. Билалов, Ю. Г. Галяметдинов, В. В. Осипова [и др.]. — Казань : КНИТУ, 2022 — Часть 2 : Практикум — 2022. — 96 с. — ISBN 978-5-7882-3093-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/331070> — Режим доступа: для авториз. пользователей.
Скопировать в буфер

V. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№ пп	Ссылка на информационный ресурс	Наименование разработки в электронной форме	Доступность
1.	http://www.biblioclub.ru	Электронно-библиотечная система (ЭБС) Университетская библиотека онлайн	Регистрация через любой университетский компьютер. В дальнейшем индивидуальный неограниченный доступ из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет

VI. СОВРЕМЕННЫЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1.	http://www.biblioclub.ru	Электронно-библиотечная система (ЭБС) Университетская библиотека онлайн	Регистрация через любой университетский компьютер. В дальнейшем предоставляется неограниченный индивидуальный доступ из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет
2.	www.garant.ru	Информационно-правовой портал	Свободный доступ
3.	www.elibrary.ru	Российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования	Свободный доступ

VII. ЛИЦЕНЗИОННОЕ И СВОБОДНО РАСПРОСТРАНЯЕМОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

При реализации учебной дисциплины применяется следующее лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Windows;
- Microsoft Office;
- LibreOffice и др.

VIII. ОБОРУДОВАНИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ, НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Учебные занятия проводятся в аудиториях, укомплектованных специализированной мебелью, в том числе стационарными или переносными техническими средствами обучения (проектор, экран, компьютер/ноутбук).

Самостоятельная работа проводится в кабинетах, оснащенных компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.