

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

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по
УР

_____ А.Е. Рудин

« 21 » 02 2023 года

Рабочая программа дисциплины

Б1.О.07

Теоретические и экспериментальные методы исследований

Учебный план: 2023-2024 18.04.01 ИПХиЭ ХТБВКиВМ ОО №2-1-97.plx

Кафедра: **54** Химических технологий им. проф. А.А. Хархарова

Направление подготовки:
(специальность) 18.04.01 Химическая технология

Профиль подготовки: Химическая технология биоактивных веществ, красителей и волокнистых
(специализация) материалов

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
		Лекции	Лаб. занятия				
2	УП	17	34	30	27	3	Экзамен
	РПД	17	34	30	27	3	
Итого	УП	17	34	30	27	3	
	РПД	17	34	30	27	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 технических наук, Профессор

Михайловская Анна
Павловна

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой химических технологий им.
проф. а.а. хархарова

Сашина Елена Сергеевна

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Сашина Елена Сергеевна

Методический отдел: Макаренко С.В.

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Сформировать у обучающихся комплекс знаний и навыков в области теоретических и экспериментальных методов в химии с целью их широкого применения при проведении научно-технологических и проектных изысканий с использованием современного приборного оборудования.

1.2 Задачи дисциплины:

1. Дать теоретические положения, лежащие в основе методов научных исследований анализ, синтез, роль законов диалектики, получение и обработка результатов и др.
2. Дать теоретические и экспериментальные основы спектральных и хроматографических методов

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

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

Процессы массопереноса в системах с участием твердой фазы

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 в соответствии с требованиями нормативно-технических документов
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: теорию физико-химических методов исследования, принципы работы основных приборов в инструментальных методах химического анализа
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
		Лек. (часы)	Лаб. (часы)			
Раздел 1. Спектральные методы анализа	2					,К
Тема 1. Составление молекулярной формулы вещества. Элементный анализ: качественный и количественный. Открытие углерода и водорода. Обнаружение галогенов, азота и серы. Определение молекулярной массы. Лабораторная работа "Элементный анализ и определение молекулярной формулы органического вещества"		2	4	2		
Тема 2. Спектроскопия в ультрафиолетовой области. Электронные состояния молекул. Электронные переходы. Основной закон светопоглощения. Аппаратура, подготовка образцов. Характеристические полосы поглощения органических насыщенных и ненасыщенных соединений. Влияние растворителей Хромофоры и ауксохромы. Правила Вудварда-Физера. Правила расчета поглощения для карбонильных соединений, монозамещенных бензолов и ароматических карбонилсодержащих соединений. Применение УФ-спектроскопии для идентификации органических соединений. Определение концентрации красителей и веществ, поглощающих в УФ-области, методом градуировочного графика. Лабораторная работа "Определение концентрации растворов методом УФ спектрофотометрии"		2	4	2	ГД	
Тема 3. Спектроскопия в инфракрасной области. Основы инфракрасной спектроскопии. Валентные и деформационные колебания. Характеристические колебательные частоты связей в молекулах органических соединений. Техника эксперимента. Метод ИК-Фурье. Модель комбинационного рассеяния. Применение ИК-спектроскопии для идентификации органических соединений, контроля направления химического процесса. Интерпретация ИК-спектров волокнистых материалов. Лабораторная работа "Идентификация органических соединений по ИК спектрам"		4	8	4	ГД	

Тема 4. Метод ядерного магнитного резонанса. Физико-химическое обоснование метода. Расчеты протонного магнитного резонанса. Вычисление ожидаемых химических сдвигов. Спин-спиновое взаимодействие в ПМР-спектрах. Лабораторная работа "Идентификация органических соединений по УФ-, ИК- и ПМР-спектрам".		4	4	4		
Раздел 2. Хроматографические методы						
Тема 5. Определение молекулярной массы Методы определения молекулярной массы, основанные на вычислении молярной концентрации раствора: криоскопический, эбулиоскопический, осмотический. Диффузионный, вискозиметрический методы, основанные на вычислении среднего размера частиц в растворе. Лабораторная работа "Определение степени полимеризации полимеров вискозиметрическим методом"		2	4	4		
Тема 6. Масс-спектрометрия Сущность метода масс-спектрометрии. Преимущества и недостатки. Схема масс-спектрометра. Ввод пробы. Способы ионизации. Масс-спектры некоторых органических соединений. Аналитические возможности метода. Лабораторная работа "Идентификация соединений по масс-хроматограммам"		1	4	4		
Тема 7. Хроматографические методы разделения и анализа. Общие положения и классификация методов хроматографии. Ионообменная хроматография. Лабораторная работа "Определение ионов в растворе" Жидкостная хроматография. Иониты. Адсорбционная и элюентная ионообменная хроматография. Способы разделения компонентов смесей на хроматографических колонках. Элюент и элюат. Обменная емкость. Газовая хроматография. Метод сравнения площадей пиков. Метод расчета калибровочных коэффициентов. Метод внутреннего стандарта. Жидкостно-жидкостная хроматография. Параметры количественной характеристики равновесного процесса. Теоретические основы колоночной хроматографии. Метод теоретических тарелок. Распределительная и осадочная бумажная хроматография. Тонкослойная хроматография. Лабораторная работа "Определение качественного состава смеси"		2	6	10	ГД	,Р
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		17	34	30		
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)		2,5		24,5		
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	Использует современные достижения науки и методологические основы фундаментальных научных знаний; теоретические и эмпирические методы исследования; методологию подготовки отчетных работ. Применяет знания фундаментальных наук при проведении исследований и создании новых направлений в своей работе. Формулирует и представляет результаты научного исследования.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания
ОПК-2	Применяет теорию физико-химических методов исследования и принципы работы основных приборов в инструментальных методах химического исследования. Использует приобретенные практические навыки в профессиональной деятельности для решения конкретных задач. Выбирает инструментальные методы химического анализа и оценки их эффективности. Интерпретирует полученные результаты.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания
ОПК-4	Оптимизирует химико-технологические процессы с учетом требований качества, надежности и стоимости. Применяет аналитические и численные методы для решения задач создания продукции с учетом требований к качеству, надежности, стоимости, а также срокам исполнения, экологической безопасности. Моделирует химико-технологические процессы. Принимает обоснованные технические решения в профессиональной деятельности, выбирает эффективные и безопасные технические средства и технологии производства.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	Полный, исчерпывающий ответ, явно демонстрирующий глубокое понимание предмета и широкую эрудицию в оцениваемой области, умение использовать теоретические знания для решения практических задач	
4 (хорошо)	Ответ полный и правильный, основанный на проработке всех обязательных источников информации. Подход к материалу ответственный, но допущены в ответах небольшие погрешности, которые устраняются только в результате собеседования	
3 (удовлетворительно)	Ответ воспроизводит в основном только лекционные материалы, без самостоятельной работы с рекомендованной литературой. Демонстрирует понимание предмета в целом при неполных, слабо аргументированных ответах. Присутствуют неточности в ответах, пробелы в знаниях по некоторым темам, существенные ошибки, которые могут быть найдены и частично устранены в результате собеседования	

2 (неудовлетворительно)	Неспособность ответить на вопрос без помощи экзаменатора. Незнание значительной части принципиально важных элементов дисциплины. Многочисленные грубые ошибки	
-------------------------	---	--

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	Спектральные области и виды взаимодействия излучения с веществом
2	Тонкослойная хроматография – основы методы, используемые сорбенты
3	Восходящая, нисходящая и круговая хроматография
4	Классификация методов бумажной хроматографии
5	Экстракция в методе жидкостно-жидкостной хроматографии
6	Качественный и количественный анализ методом газовой хроматографии
7	Сущность ионообменной хроматографии
8	Различие методов адсорбционной и распределительной хроматографии
9	Классификация методов хроматографии по технике и способу проведения эксперимента
10	Сущность хроматографического разделения по методу осадочной хроматографии
11	Достоинства и недостатки адсорбционной хроматографии
12	Наиболее распространенные растворители в жидкостно-адсорбционной хроматографии
13	Спектроскопия ПМР органических соединений, содержащих активный водород (спирты, амины, карбоновые кислоты)
14	Спектроскопия протонно-магнитного резонанса производных бензола
15	Спектроскопия протонно-магнитного резонанса алкенов
16	Эффекты экранирования протонов в спектрах ПМР алканов
17	Понятие о химическом сдвиге в спектроскопии протонно-магнитного резонанса
18	Химические элементы, ядра которых можно наблюдать методом ядерно-магнитного резонанса
19	Основные уравнения ядерно-магнитного резонанса
20	Инфракрасная спектроскопия азотсодержащих соединений
21	Инфракрасная спектроскопия карбонилсодержащих соединений
22	Инфракрасная спектроскопия гидроксисоединений
23	Инфракрасная спектроскопия ароматических углеводов
24	Инфракрасная спектроскопия этиленовых углеводов
25	Инфракрасная спектроскопия: валентные и деформационные колебания
26	Поглощение в ультрафиолетовой области моно- и дизамещенных бензолов
27	Поглощение в ультрафиолетовой области диеновых и непредельных карбонилсодержащих соединений
28	Основные хромофоры и ауксохромы. Сдвиги и изменение интенсивности полос поглощения в УФ-спектрах
29	Основные характеристики УФ-спектра. Молярный коэффициент экстинкции и оптическая плотность
30	Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой области: электронные переходы

5.2.2 Типовые тестовые задания

не предусмотрено

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. При сжигании образца массой 4.337 мг, получили 10.35 мг CO₂ и 3.42 мг H₂O. Найдите молекулярную формулу этого соединения, если его молекулярная масса равна 342 а.е.м.

2. Рассчитайте процентную концентрацию раствора бензилового спирта (1.0453 г/см³) в воде с пропусканием 84.5%, который находится в кварцевой кювете толщиной 10 мм. Коэффициент экстинкции при 208 нм равен 2100.

3. В ИК-спектре вещества имеются полосы поглощения при 3450, 3370, 1630 см⁻¹. Какому из приведенных соединений CH₃CON(CH₃)₂, CH₃CONHCH₃, CH₃CONH₂ соответствует спектр?

4. Объясните, каким протонам соответствуют в ПМР-спектре следующие сигналы диэтилового эфира янтарной кислоты: 1.25 м. д. (триплет), 2.62 м. д. (синглет), 4.15 м. д. (квадруплет).

5. Установите строение вещества состава C₇H₇Br, имеющего следующие спектральные характеристики: 1) в ПМР-спектре наблюдаются три сигнала при 2.40 м.д. (синглет), 7.20 и 7.50 м.д. (два симметричных дублета АВ-системы) с интенсивностью 3:2:2; в) в ИК-спектре расположены полосы поглощения при 3030, 2930, 2840, 1500, 810 см⁻¹ и ряд других менее интенсивных; 3) в УФ-спектре в областях 210-220 и 260-265 нм существуют две полосы поглощения. Приведите расчеты относительных химических сдвигов протонов для теоретического ПМР-спектра.

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

Студент имеет право пользоваться справочным материалом. Время подготовки для ответа на экзамене - 60 мин.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Пашкова, Е. В., Волосова, Е. В., Шипуля, А. Н., Безгина, Ю. А., Глазунова, Н. Н.	Спектральные методы анализа	Ставрополь: Ставропольский государственный аграрный университет	2017	http://www.iprbooksh op.ru/76055.html
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	<a href="http://www.iprbooksh
op.ru/70160.html">http://www.iprbooksh op.ru/70160.html
Вероника, Р., Петухов, И. А., Петухова, О. А., Гомбоева, С. Б., Богомолова, А. А., Бару, М. Б., Бару, М. Б.	Практическая высокоэффективная жидкостная хроматография	Москва: Техносфера	2017	<a href="http://www.iprbooksh
op.ru/84700.html">http://www.iprbooksh op.ru/84700.html
Фарафонова, О. В., Карасева, Н. А.	Спектральные методы анализа	Липецк: Липецкий государственный технический университет, ЭБС АСВ	2019	<a href="http://www.iprbooksh
op.ru/99155.html">http://www.iprbooksh op.ru/99155.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.iprbooksh op.ru/58227.html
Старикова Т. А., Лысова С. С., Зевацкий Ю. Э., Холохонова Л. И.	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа. Физико- химические методы исследования. Ионообменная хроматография	СПб.: СПбГУПТД	2016	http://publish.sutd.ru/ tp_ext_inf_publish.ph p?id=3162

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Научная электронная библиотека www.elibrary.ru

Библиографическая и реферативная база данных научных изданий scopus.com

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional

Microsoft Windows

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

Для проведения лабораторных работ используется специализированная учебная химическая лаборатория, оснащенная оборудованием, химической посудой и реактивами.

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска