

Донбаська державна машинобудівна академія (ДДМА)
Факультет інтегрованих технологій і обладнання (ФІТО)
Кафедра хімії та охорони праці

“ЗАТВЕРДЖУЮ”
Завідувач кафедри хімії
та охорони праці



А.П. Авдеєнко

“ 27 ” серпня 2020 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

«СУЧАСНІ МЕТОДИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ХІМІЧНИХ СПОЛУК»

Галузь знань	10 «Природничі науки»
Спеціальність	102 «Хімія»
Освітньо-професійна програма	<u>«Хімія харчових продуктів»</u>

2020-2021 навчальний рік

Робоча програма «Сучасні методи ідентифікації хімічних сполук» для студентів галузі знань 10 «Природничі науки», спеціальності 102 «Хімія», освітньо-професійна програма «Хімія харчових продуктів», 27 серпня 2020 року. – 17 с.

Розробник: **Юсіна Ганна Леонідівна**,
доцент кафедри хімії та охорони праці, к.х.н.

Робоча програма схвалена на засіданні кафедри хімії та охорони праці

Протокол № 1 від 27 серпня 2020 року

Завідувач кафедри хімії та охорони праці



(Авдєєнко А.П.)

(підпис)

“ 27 ” серпня 2020 року

©Юсіна Г.Л., 2020 рік

© ДДМА, 2020 рік

Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів – 7	Галузь знань 10 «Природничі науки» Спеціальності 102 «Хімія»	Обов'язкова
Змістових модулів – 4	Освітньо-професійна програми: «Хімія харчових продуктів»	Рік підготовки: 1-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання — (назва)		Семестр
Загальна кількість годин – 210		2-й
		Лекції 30 год.
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 5 самостійної роботи студента – 9	Освітньо-кваліфікаційний рівень: магістр	Практичні, семінарські 15 год.
		Лабораторні 30 год.
		Самостійна робота 135 год.
		Індивідуальні завдання: 0 год.
		Вид контролю: іспит

Примітка.

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить: 75/135

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Методи дослідження речовин у цей час знайшли великий розвиток и застосування у розв'язанні хімічних задач з ідентифікації, встановленні хімічної будови речовин та у вивчанні зв'язку між властивостями речовини і її хімічної будови. Вивчення цього курсу дає студентам широкі знання фундаментальних наукових положень, які, змінюючись повільно, необхідні як для роботи за спеціальністю, так і для розуміння основних напрямів розвитку хімічної науки. Фізичні методи та їх впровадження в хімічні дослідження збільшують ефективність досліджень на шляху їх автоматизації і математизації. Перспективи розвитку хімії пов'язані з розширенням застосування фізичних методів.

Мета курсу: Сформувати поняття про основи деяких сучасних спектральних методів аналізу, знання яких дозволяє більш глибоко і обґрунтовано підходити до інтерпретації різноманітних результатів досліджень в хімії.

Завдання курсу:

• **Теоретичні:**

1. Сформувати теоретичні основи основних спектральних методів аналізу: теоретичні основи методів, апаратура, техніка виконання аналізів.

• **Практичні:**

1. На основі теоретичних знань набути вміння, використовуючи фізико-хімічні методи аналізу, визначати склад і будову різноманітних індивідуальних неорганічних, органічних та елементорганічних сполук та виконувати кількісний аналіз сумішей.

Перелік знань та умінь студентів

Студент повинен знати:

- особливості методів аналізу;
- області використання методів аналізу;
- класифікацію фізико-хімічних методів;
- теоретичні основи, апаратуру і техніку виконання методів.

Студент повинен вміти:

- визначати склад хімічних сполук;
- встановлювати будову хімічних сполук;
- виконувати кількісний аналіз сумішей.
- застосовувати сумісне використання декількох методів при вирішенні складних задач;
- правильно представляти результати досліджень на конференціях та в науковій літературі.

Курс базується на знаннях одержаних студентами при вивченні дисциплін «Вища математика», «Фізика», «Квантова хімія», «Будова речовини», «Неорганічна хімія», «Фізична хімія», «Аналітична хімія», «Органічна хімія», а також пов'язаний з курсами «Методи органічного синтезу», «Стереохімія», «Хімія гетероциклічних сполук», «Будова та реакційна здатність органічних сполук».

3. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Хроматографічний та рефрактометричний аналіз

Тема 1. Хроматографічні методи аналізу.

Виникнення та розвиток хроматографічних методів. Теоретичні положення хроматографії. Концепція теоретичних тарілок. Теорія швидкостей. Сорбційні та десорбційні процеси. Сили взаємодії та коефіцієнт розподілення.

Тема 2. Газорідинна хроматографія (ГРХ).

Хроматограма та елюаційні характеристики. Вплив різних факторів на хроматографічне розділення речовин. Техніка та матеріали для ГРХ. Кількісний аналіз за допомогою ГРХ. Можливі помилки. Визначення площин хроматографічних піків. *Реакційно-хроматографічні методи аналізу (РХ)*. Схема та принцип РХ методу. Принципова схема та умови проведення аналізу.

Тема 3. Рефрактометричний аналіз.

Закони відбиття і заломлення світла. Показник заломлення. Фактори, що впливають на значення показника заломлення. Визначення концентрації речовин за показником заломлення

Змістовий модуль 2. Спектрометричні методи

Тема 4.

Мас-спектрометри: принцип дії. Обробка мас-спектр. Коротка історична справка розвитку метода мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометра Демпстера. Типи мас-спектрометрів Система напуску. Камера іонізації. Розрішуюча здатність приладу Обробка мас-спектра .Табличний та графічний види запису мас-спектрів

Тема 5. Основні теорії і поняття мас-спектрометрії. Іонізація

Іонізація: дисоціативна та асоціативна. Методи іонізації. Потенціали іонізації . та появи іонів. Енергія розриву зв'язків. Принцип Франка-Кондона. Рівноважна теорія Ейрінга. Основні поняття мас-спектрометрії . Правила мас-спектрометрії. Азотне правило. Типи іонів мас-спектрометрії. Метастабільні переходи

Тема 6. Застосування мас-спектроскопії для вирішення хімічних задач.

Встановлення бруто-формули речовини за співвідношенням ізотопів в мас-спектрі. Ідентифікація. Шляхи фрагментації хімічних сполук в мас-спектрометрії

Тема 7. Фізичні основи та вимірювання спектрів ЯМР.

Магнітні властивості ядер. дерний спіні. Головне рівняння спектроскопії ЯМР. Релаксація в ЯМР. Характеристики спектрометрів ЯМР. Експериментальні методи в ЯМР-спектроскопії

Тема 8. Хімічний зсув. Константа екранування та її складові.

Хімічний зсув, одиниці вимірювання. Шкали хімічних зсувів. Константа магнітного екранування. Адитивні схеми розрахунку хімічних зсувів. Формула Мак-Конела. Міжмолекулярна складова констант магнітного екранування. Вплив хімічних реагентів на хімічний зсув

Тема 9. *Спін-спінова взаємодія (ССВ). Значення констант ССВ.*

Спін-спінова взаємодія: природа. Константа ССВ. Правила оцінки мультиплетності. Уявлення про спинові системи. Аналіз спектрів ЯМР. Електронний парамагнітний резонанс

Змістовий модуль 3. Методи інфрачервоної (ІЧ) та ультрафіолетової (УФ) спектроскопії.

Тема 10. *Фізична сутність спектрів поглинання. Коливальні переходи.*

Типи коливань.

Модель гармонічного осцилятора. Типи коливальних переходів, обертони. Механіка коливань. Валентні та деформаційні коливання. Основні характеристики смуг поглинання. Силкові сталі, характеристичність та природа хімічного зв'язку.

Тема 11. *Інфрачервоний спектрофотометр. Реєстрація спектрів.*

Типи ІЧ спектрофотометрів. Принцип дії скануючого диспергуючого спектрофотометра. Характер і підготовка зразків.

Тема 12. *Структурний аналіз за ІЧ-спектрами. Використання ІЧ-спектроскопії для розв'язування хімічних питань.*

Інтерпретація ІЧ спектрів. Кількісний аналіз. Дослідження рівноваг та комплексів з водневими зв'язками. Проведення кінетичних досліджень.

Тема 13. *Основні поняття і закони УФ-спектроскопії. УФ-спектр та його будова.*

Збудження молекул під дією електромагнітного випромінення. Типи електронних переходів.

Тема 14. *Зв'язок УФ-спектрів з будовою хімічних сполук. Застосування УФ-спектроскопії в хімії.*

Ізольовані хромофори. Спряжені хромофори. Класифікація, характеристика та властивості основних електронних смуг поглинання.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	у тому числі					
	Усього	Лекц	Практ.	Лаб	Інд	с.р.
Змістовий модуль 1 Хроматографічний та рефрактометричний аналіз						
Тема 1. Хроматографічні методи аналізу	13	2		2		9
Тема 2. Газорідинна хроматографія (ГРХ) Реакційно-хроматографічні методи аналізу (РХ)	14	2		2		10
Тема 3. Рефрактометричний аналіз.	15	2	1	2		10
Разом за змістовим модулем 1	42	6	1	6		29
Змістовий модуль 2 Спектрометричні методи						
Тема 4. Мас-спектрометри: принцип дії. Обробка маспектра .	13	2		2		9
Тема 5. Основні теорії і поняття мас-спектрометрії. Іонізація	16	2	2	2		10
Тема 6 Застосування мас-спектроскопії для вирішення хімічних задач	16	2	2	2		10
Разом за змістовим модулем 2	45	6	4	6		29
Змістовий модуль 3. ЯМР-спектроскопія						
Тема 7. Фізичні основи та вимірювання спектрів ЯМР.	13	2		2		9
Тема 8. Хімічний зсув. Константа екранування та її складові.	17	3	2	2		10
Тема 9. Спін-спінова взаємодія (ССВ). Значення констант ССВ..	17	3	2	2		10
Разом за змістовим модулем 3	47	8	4	6		29
Змістовий модуль 4. Методи інфрачервоної (ІЧ) та ультрафіолетової (УФ) спектроскопії						
Тема 10. Фізична сутність спектрів поглинання. Коливальні переходи. Типи коливань.	14	2		2		10
Тема 11. Інфрачервоний спектрофотометр. Реєстрація спектрів	15	2	2	2		9
Тема 12. Структурний аналіз за ІЧ-спектрами. Використання ІЧ-спектроскопії для розв'язування хімічних питань.	18	2	2	4		10
Тема 13. Основні поняття і закони УФ-спектроскопії. УФ- спектр та його будова..	13	2		2		9
Тема 14. Зв'язок УФ-спектрів з будовою хімічних сполук . Застосування УФ-спектроскопії в хімії.	16	2	2	2		10
Разом за змістовим модулем 4	76	10	6	12		48
Усього годин	210	30	15	30		135

5. Лекції

Змістовий модуль 1. Хроматографічний та рефрактометричний аналіз

Тема 1. Хроматографічні методи аналізу.

Виникнення та розвиток хроматографічних методів. Теоретичні положення хроматографії. Концепція теоретичних тарілок. Теорія швидкостей. Сорбційні та десорбційні процеси. Сили взаємодії та коефіцієнт розподілення.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 1], [5].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [1, 5].

Тема 2. Газорідинна хроматографія (ГРХ).

Хроматограма та елюаційні характеристики. Вплив різних факторів на хроматографічне розділення речовин. Техніка та матеріали для ГРХ. Кількісний аналіз за допомогою ГРХ. Можливі помилки. Визначення площин хроматографічних піків. *Реакційно-хроматографічні методи аналізу (РХ)*. Схема та принцип РХ методу. Принципова схема та умови проведення аналізу.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 1], [5].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [1, 5].

Тема 3. Рефрактометричний аналіз.

Закони відбиття і заломлення світла. Показник заломлення. Фактори, що впливають на значення показника заломлення. Визначення концентрації речовин за показником заломлення

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 2], [5].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [1, 5].

Змістовий модуль 2. Спектрометричні методи

Тема 4. Мас-спектрометри: принцип дії. Обробка мас-спектр . Коротка історична справка розвитку метода мас-спектрометрії. Блок-схема мас-спектрометра Демпстера. Типи мас-спектрометрів Система напуску. Камера іонізації. Розрішуюча здатність приладу Обробка мас-спектра .Табличний та графічний види запису мас-спектрів.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 3], [2], [7-14].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [7-14].

Тема 5. Основні теорії і поняття мас-спектрометрії. Іонізація

Іонізація: дисоціативна та асоціативна. Методи іонізації. Потенціали іонізації . та появи іонів. Енергія розриву зв'язків. Принцип Франка-Кондона. Рівноважна теорія Ейрінга. Основні поняття мас-спектрометрії . Правила мас-спектрометрії. Азотне правило. Типи іонів мас-спектрометрії. Метастабільні переходи.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 3], [2], [7-14].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [7-14].

Тема 6. *Застосування мас-спектроскопії для вирішення хімічних задач.*

Встановлення бруто-формули речовини за співвідношенням ізотопів в мас-спектрі. Ідентифікація. Шляхи фрагментації хімічних сполук в мас-спектрометрії.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 3], [2], [7-14].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [7-14].

Змістовий модуль 3. ЯМР-спектроскопія

Тема 7. *Фізичні основи та вимірювання спектрів ЯМР.*

Магнітні властивості ядер. дерний спіні. Головне рівняння спектроскопії ЯМР. Релаксація в ЯМР. Характеристики спектрометрів ЯМР. Експериментальні методи в ЯМР-спектроскопії.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 4], [2-4], [16-20].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [16-20].

Тема 8. *Хімічний зсув. Константа екранування та її складові.*

Хімічний зсув, одиниці вимірювання. Шкали хімічних зсувів. Константа магнітного екранування. Адитивні схеми розрахунку хімічних зсувів. Формула Мак-Конела. Міжмолекулярна складова констант магнітного екранування. Вплив хімічних реагентів на хімічний зсув.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 4], [2-4], [16-20].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [16-20].

Тема 9. *Спін-спінова взаємодія (ССВ). Значення констант ССВ.*

Спін-спінова взаємодія: природа. Константа ССВ. Правила оцінки мультиплетності. Уявлення про спинові системи. Аналіз спектрів ЯМР. Електронний парамагнітний резонанс.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 4], [2-4], [16-20].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [16-20].

Змістовий модуль 4. Методи інфрачервоної (ІЧ) та ультрафіолетової (УФ) спектроскопії.

Тема 10. *Фізична сутність спектрів поглинання. Коливальні переходи.*

Типи коливань.

Модель гармонічного осцилятора. Типи коливальних переходів, обертони. Механіка коливань. Валентні та деформаційні коливання. Основні характеристики смуг поглинання. Силкові сталі, характеристичність та природа хімічного зв'язку.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 5], [2-4], [19-24].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [19-24].

Тема 11. *Інфрачервоний спектрофотометр. Реєстрація спектрів.*

Типи ІЧ спектрофотометрів. Принцип дії скануючого диспергуючого спектрофотометра. Характер і підготовка зразків.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 5], [2-4], [19-24].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [19-24].

Тема 12. *Структурний аналіз за ІЧ-спектрами. Використання ІЧ-спектроскопії для розв'язування хімічних питань.*

Інтерпретація ІЧ спектрів. Кількісний аналіз. Дослідження рівноваг та комплексів з водневими зв'язками. Проведення кінетичних досліджень.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 5], [2-4], [19-24].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [19-24].

Тема 13. *Основні поняття і закони УФ-спектроскопії. УФ-спектр та його будова.*

Збудження молекул під дією електромагнітного випромінення. Типи електронних переходів.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 5], [2-4], [19-24].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [19-24].

Тема 14. *Зв'язок УФ-спектрів з будовою хімічних сполук. Застосування УФ-спектроскопії в хімії.*

Ізольовані хромофори. Спряжені хромофори. Класифікація, характеристика та властивості основних електронних смуг поглинання.

Дидактичні матеріали: табличний, плакати, слайди.

Література: [1, розділ 5], [2-4], [19-24].

Завдання на СРС: поглиблення знань з теми [19-24].

6 Теми лабораторних робіт

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Методи очищення сполук: перекристалізація, перегонка, екстракція	4
2	Попередні випробування, визначення фізичних сталих, дослідження розчинності	2
3	Визначення молекулярної формули. Якісний елементний функційний аналіз	4
4	Визначення молекулярної формули. Якісний функційний аналіз	4
5	Дослідження реакційних сумішей за допомогою методу ТШХ.	4
6	Розділення реакційних сумішей за допомогою методу ТШХ в незакріпленому шарі.	4
7	Особливості зміни елюотропних характеристик на прикладі хроматографування холестерину	2
8	Рефрактометричний аналіз. Визначення показника заломлення рідини	2
9	Отримання функційних похідних	4
	Всього	30

6 Теми практичних робіт

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Обробка мас-спектра. Визначення будови сполуки за даними мас-спектра і встановленою схемою фрагментації.	4
2	Основні поняття спектроскопії ЯМР. Хімічний зсув, способи його вираження. Спін-спінова взаємодія (ССВ). Значення констант ССВ. Правила оцінки мультиплетності.	3
3	Розшифрування спектрів ЯМР. Зв'язок спектрів ЯМР з будовою хімічних сполук. Застосування спектроскопії ЯМР в хімії.	3
4	Основні поняття ІЧ спектроскопії. Зв'язок ІЧ спектрів з будовою хімічних сполук. Пряма та зворотна спектральні задачі. Побудова коливань органічних молекул.	3
5	Розшифрування ІЧ спектрів. Інтерпретація ІЧ спектру. Проведення структурного аналізу за ІЧ спектром. Застосування УФ спектроскопії в хімії.	2
	Всього	15

7. Самостійна робота

№ з/п	Назви змістових модулів і тем	Кількість годин
1	Тема 1. Хроматографічні методи аналізу	9
2	Тема 2. Газорідинна хроматографія (ГРХ) Реакційно-хроматографічні методи аналізу (РХ)	10
3	Тема 3. Рефрактометричний аналіз.	10
4	Тема 4. Мас-спектрометри: принцип дії. Обробка масспектра .	9
5	Тема 5. Основні теорії і поняття мас-спектрометрії. Іонізація	10
6	Тема 6 Застосування мас-спектроскопії для вирішення хімічних задач	10
7	Тема 7. Фізичні основи та вимірювання спектрів ЯМР.	9
8	Тема 8. Хімічний зсув. Константа екранування та її складові.	10
9	Тема 9. Спін-спінова взаємодія (ССВ). Значення констант ССВ..	10
10	Тема 10. Фізична сутність спектрів поглинання. Коливальні переходи. Типи коливань.	9
11	Тема 11. Інфрачервоний спектрофотометр. Реєстрація спектрів	10
12	Тема 12. Структурний аналіз за ІЧ-спектрами. Використання ІЧ-спектроскопії для розв'язування хімічних питань.	9
13	Тема 13. Основні поняття і закони УФ-спектроскопії. УФ- спектр та його будова..	10
14	Тема 14. Зв'язок УФ-спектрів з будовою хімічних сполук . Застосування УФ-спектроскопії в хімії.	10
	Усього	135

8. Індивідуальні завдання

Індивідуальні завдання не плануються.

9. Методи навчання

За джерелами знань використовуються такі методи навчання: словесні – розповідь, пояснення, лекція, інструктаж; наочні – демонстрація, ілюстрація.

За характером логіки пізнання використовуються такі методи: аналітичний, синтетичний, аналітико-синтетичний, індуктивний, дедуктивний.

За рівнем самостійної розумової діяльності використовуються методи: проблемний, частково-пошуковий, дослідницький.

Для поліпшення викладання лекційного матеріалу передбачено використання кожним студентом під час лекції дидактичних засобів навчання (слайдів або плакатів та роздавального матеріалу); передбачено постановка проблемних питань та ситуацій при викладанні матеріалу з теми.

Для покращення засвоєння матеріалу студентами їм рекомендується поглиблене самостійне вивчення окремих питань. Успіх вивчення дисципліни залежить від систематичної самостійної роботи студента з матеріалами лекцій і рекомендованою літературою.

10. Методи контролю

Передбачається використання модульно-рейтингової системи оцінювання знань. Основною формою контролю знань студентів в кредитно модульній системі є складання студентами запланованого модулю. Формою контролю є накопичувальна система. Складання модуля передбачає виконання студентом комплексу заходів, запланованих кафедрою і передбачених семестровим графіком навчального процесу та контролю знань студентів, затверджених деканом факультету.

Підсумкова оцінка за модуль виставляється за 100-бальною шкалою. При умові, що студент успішно здає всі контрольні точки, набравши з кожної з них не менше мінімальної кількості балів, необхідної для зарахування відповідної контрольної точки, має за результатами роботи в триместрі підсумковий рейтинг не менше 55 балів, то за бажанням студента в залежності від суми набраних балів йому виставляється підсумкова екзаменаційна оцінка за національною шкалою і шкалою ECTS. Переведення набраних студентом балів за 100-бальною шкалою в оцінки за національною (5-бальною) шкалою та шкалою ECTS здійснюється в відповідності до таблиці:

Рейтинг студента за 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою	Оцінка за шкалою ECTS
90-100 балів	відмінно	A
81-89 балів	добре	B
75-80 балів	добре	C
65-74 балів	задовільно	D
55-64 балів	задовільно	E
30-54 балів	незадовільно з можливістю повторного складання	FX
1-29 балів	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	F

Контроль знань студентів передбачає проведення вхідного, поточного і підсумкового контролю.

Вхідний контроль знань проводиться на першому тижні другого семестру, в якому вивчається навчальна дисципліна, і включає контроль залишкових знань з окремих навчальних дисциплін, які передують вивченню дисципліни «Сучасні фізико-хімічні методи ідентифікації хімічних сполук» і є базовими для її засвоєння.

Поточний контроль знань студентів включає письмові контрольні роботи з окремих тем модуля дисципліни та виконання індивідуального завдання. Питання для підготовки до контрольних робіт наведено у додатку А.

Контрольні роботи з теоретичної частини дисципліни за розподілені таким чином:

№ п/п	№ теми	Тема контрольної роботи	Кількість варіантів
1	1-3	КР1 за темами змістовного модуля 1.	30
2	4-10	КР2 за темами змістовного модуля 2	30
3	11-14	КР3 за темами змістовного модуля 3	20
4	-	Захист лабораторних робіт	20

Підсумковий контроль знань включає іспит (письмовий) після завершення вивчення дисципліни наприкінці семестру та визначення рейтингу за підсумками роботи студента в семестрі і рейтингу з навчальної дисципліни.

Зразок білету для проведення підсумкового контролю наведено у додатку В .

11 Семестровий графік навчального процесу та контролю знань

Вид навчальних занять або контролю	Розподіл між учбовими тижнями															Підсумкового семестровий контроль
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
Лекції	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	
Лабораторні роб.	2			2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	
	2		2		2		2		2		2		2		1	
Сам. робота	9	9	8	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	
КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		КСР		
Контрольні роботи					К1					К2				ЗЛР	К3	

ВК – вхідний контроль; К– письмова контрольна робота; КСР – консультація;

12. Система оцінки знань студентів

№ п/п	Форма контролю	№ навчального тижня	Кількість балів		Короткий зміст контрольної точки й час на її проведення	Література
			максимальна	мінімальна		
1	Контрольна робота № 1	5	30	15	Проводиться в години самостійних занять або на консультації протягом однієї пари (2 академічні години). Завдання на контрольну роботу включає питання в формі тестів. Питання з тем 1-3	[1, розділ 1], [5]
2	Контрольна робота № 2	10	30	15	Проводиться в години самостійних занять або на консультації протягом однієї пари (2 академічні години). Завдання на контрольну роботу включає питання в формі тестів. Питання з тем 1-3 Питання з тем 4-10	[1, розділ 4], [2-4], [16-20]
2	Контрольна робота № 3	15	20	10	Проводиться в години лекційних занять протягом однієї пари. Завдання на контрольну роботу включає питання в формі тестів. Питання з тем 4-10	[1, розділ 5], [2-4], [19-24].
3	Захист лабораторних робіт	14	20	15	Проводиться в години лабораторних занять у формі усного опитування	[2-6]
Разом			100	55		

Методичне забезпечення

1. Фізико-хімічні методи ідентифікації органічних сполук : скорочений конспект лекцій для студентів спеціальності «Хімія» / Укл.: Юсіна Г.Л. – Краматорськ : ДДМА, 2020. – 56 с.

13 Рекомендована література

2 Прикладна спектроскопія: Навчальний посібник / Капустяник В. Б., Мокрий В. І. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2009. – 302 с.

3 Органическая химия. Идентификация органических соединений. Практикум : учеб. пособие для студентов химико-технологических специальностей / С. Г. Михалёнок [и др.]. – Минск : БГТУ, 2011. – 162 с. ISBN

978-985-530-108-1.

4 Д.Браун, А.Флойд, М.Сейнзбери. Спектроскопия органических веществ. – Москва, Мир, 1992

5 Зінчук В.К., Левицька Г.Д., Дубенська Л.О. Фізико-хімічні методи аналізу: Навчальний посібник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2008. – 362 с.

6 Мельничук Д.О. Аналітичні методи досліджень. Спектроскопічні методи аналізу: теоретичні основи і методики: навчальний посібник для підготовки студентів вищих навчальних закладів / Д.О. Мельничук, С.Д. Мельничук, В.М. Войціцький та ін.: за ред. акад. Д.О. Мельничука. – К.: ЦП «Компринт», 2016. – 289 с.

7 А.А. Полякова. Молекулярный масс-спектральный анализ органических соединений. // -М.: Химия, 1983. - 248 С.

8 Ю.С. Ходеев. Современный уровень и тенденции развития масс-спектрометрии для научных исследований. // -М.: ЦНИИТЭИ, 1980. - 31 С.

9 П.Б. Терентьев. Масс-спектропия в органической химии. // -М.: Высш. шк., 1979. - 223 С.

10 В.И. Хвостенко. Масс-спектрометрия отрицательных ионов в органической химии. // -М.: Наука, 1981. - 158 С.

11 Р. Джонстон. Руководство по масс-спектропии для химиков-органиков. // - М.: Мир, 1975. - 235 С.

12 А.А. Полякова, Р.А. Хмельницкий. Масс-спектрометрия в органической химии. // -Л.: Химия, 1972. - 365 С.

13 Д. Бейнон. Масс-спектрометрия и ее применение в органической химии. // -М.: Мир, 1966. - 701 С.

14 П. Будзикович, Д. Джирасси, Д. Уильямс. Интерпретация масс-спектров органических соединений. // -М.: Мир, 1966. - 320 С.

15 Р. Райд Курс физической органической химии // -М.: Мир, 1972. – 242 С.

16 Д. Сильверстейн, Г. Басслер, Т. Моррил. Спектрометрическая идентификация органических соединений. // М.: Мир, 1977. - 591 С.

17 Л.А. Казичина, Н.Б. Куплетская. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и массспектропии в органической химии. // -М.: Изд-во МГУ, 1979. - 240 С.

18 Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин. Физические методы определения строения органических молекул. // -Л.: Изд-во ЛГУ, 1978. - 344 С.

19 О.В. Свердлова. Электронные спектры в органической химии. // -Л.: Химия, 1973. - 248 С.

20 Э. Штерн, К. Тиммонс. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии. // -М.: Мир, 1974. - 295 С.

21 Л. Беллами. Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул. // -М.: Мир, 1971. - 318 С.

22. К. Наканиси. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. // -М.: Мир, 1965. - 210 С.

23. Т.Я. Паперно, В.П. Поздняков и др. Физико-химические методы исследования в органической и биологической химии. // -М.: Просвещение,

1977. - 155 С.

24 Л.М. Свердлова, М.А. Ковнер, Е.П. Крайнов. Колебательные спектры многоатомных молекул. // -М.: Наука, 1970. - 559 С.

25. Б.Т. Ионин, Б.А. Ершов. ЯМР-спектроскопия в органической химии. // - Л.: Химия, 1967. - 328 С.

27. Х. Гюнтер. Введение в курс спектроскопии ЯМР. // -М.: Мир1984. – 478 С. ,

28 Ядерный магнитный резонанс. // -Л.: Изд-во ЛГУ, 1982. - 344 С.9

14 Інформаційні ресурси

<http://www.mrfn.org/ucsb/chem/icp.pdf>

https://en.wikipedia.org/wiki/Inductively_coupled_plasma_atomic_emission_spectroscopy <http://www-odp.tamu.edu/publications/tnotes/tn29/technot2.htm>

http://www.unn.ru/books/met_files/RFA.pdf

<http://spectronxray.ru/support/service/basic-rfa/>

Робоча програма складена
доц. кафедри ХіОП, к.х.н.



Юсіна Г.Л.

Тести для підготовки до контрольної роботи №1

Запитання: 1: Фізико-хімічні методи аналізу ґрунтуються на вимірі:

- Спектрів поглинання речовин, одержаних в результаті хімічних реакцій
- Спектрів поглинання речовин
- Електропровідності
- Природної флуоресценції сполук

Запитання: 2: Який із методів забезпечує найбільшу вибірковість?

- Гравіметрія
- Атомна абсорбція
- Полярографія
- Хроматографія

Запитання: 3: Який із методів має найбільшу перевагу при аналізі зразка невідомого складу?

- Радіометричний
- Електрохімічний
- Хроматомасспектрометричний
- Хроматографічний
- Гравіметричний

Запитання: 4: Який із методів хроматографії найчастіше використовується для аналізу суміші газів?

- Іоно-обмінна хроматографія
- Тонкошарова хроматографія
- Газо-адсорбційна хроматографія
- Розподільча хроматографія

Запитання: 5: Який із методів має більшу чутливість?

- Фотометричний
- Люмінесцентний
- Обидва методи мають низьку чутливість
- Обидва методи мають високу чутливість

Запитання: 6: Який із методів, що використовують для кількісного аналізу речовин, є найбільш точним?

- Метод добавок
- Метод порівняння
- Метод градуіровочного графіка
- Метод обмежуючих стандартів

Запитання: 7: Хроматографічний аналіз ґрунтується на явищі:

- Сорбції
- Адсорбції
- Десорбції
- Абсорбції

Запитання: 8: Який з методів ґрунтується на вимірюванні поглинання світлової енергії суспендованими частинками досліджуваної речовини?

- Люмінесцентний
- Нефелометричний
- Турбідиметричний

- Фотометричний

Запитання: **9:** Який з методів ґрунтується на вимірюванні розсіювання світлової енергії?

- Турбідиметричний
- Спектрофотометричний
- Люмінесцентний
- Нефелометричний

Запитання: **10:** Який з методів ґрунтується на вимірюванні випромінювання, що виникає в результаті виділення енергії збудженими молекулами досліджуваної речовини?

- Фотометричний
- Нефелометричний
- Турбідиметричний
- Люмінесцентний

Запитання: **11:** Які з методів відзначаються високою чутливістю і вибірковістю?

- Фізико-хімічні
- Хімічні
- Фізичні
- Електрохімічні

Запитання: **12:** З підвищенням чутливості методу точність визначення:

- Різко підвищується
- Підвищується
- Знижується
- Не змінюється

Запитання: **13:** Із зменшенням визначуваної концентрації точність і відтворюваність результатів визначень:

- Різко підвищується
- Підвищується
- Не міняється
- **100%** Знижується

Запитання: **14:** До хімічних методів аналізу відносяться:

- Фотометричний, електроваговий, радіометричний
- Титриметричний, нейтралізації, фотометричний
- Гравіметричний, титриметричний, хроматографічний
- Гравіметричний, титриметричний, нейтралізації

Запитання: **15:** Яким із методів визначають елементний склад речовин?

- Спектрофотометричним
- Спектральним
- Гравіметричним
- Титриметричним

Запитання: **16:** Результати якого методу аналізу разраховують по графіку залежності струму від потенціалу?

- Атомної абсорбції
- Хроматографії
- Полярографії

- Молекулярної абсорбції

Запитання: **17:** Результати якого методу аналізу розраховують по графіку залежності поглинання від довжини хвилі?

- Титриметричного
- Хроматографії
- Полярографії
- Абсорбційної спектроскопії

Запитання: **18:** Інструментальними називають методи аналізу:

- Фізичні і фізико-хімічні
- Фізичні
- Хімічні
- Біологічні

Запитання: **19:** При недостатній чутливості визначення найчастіше використовують:

- Збільшення наважки визначуваної речовини
- Концентрування визначуваної речовини
- Заміну методики аналізу
- Заміну приладу на більш чутливий

Запитання: **20:** До яких методів аналізу відноситься атомно-абсорбційна спектрофотометрія /ААС/?

- Фізико-хімічних
- Біологічних
- Хімічних
- Фізичних

Запитання: **21:** В чому головна перевага спектрофотометричних методів перед фотоколориметричними?

- Висока чутливість
- Можливість вибору найбільш селективного реагенту
- Можна визначити більшу кількість компонентів
- Можливість проводити вимірювання в УФ, ІЧ та видимій частинах спектра
- Можливість вивчення спектрів поглинання

Запитання: **22:** Які з розчинів використовують для одержання градуіровочних графіків?

- З концентрацією визначуваного компоненту 1 мкг/мл
- Стандартні робочі
- З точно встановленою концентрацією
- Стандартні вихідні

Запитання: **23:** У яких випадках використовують метод градуіровочного графіка?

- Для проведення аналізу в присутності заважаючих компонентів
- Для підвищення точності визначення
- Для експресних визначень
- Для аналізу складних забарвлених розчинів
- При виконанні серійних аналізів

Запитання: **24:** Основна вимога до градуіровочного графіка:

- Оптична густина досліджуваного розчину повинна відповідати приблизно середині кривої
- Повинен охоплювати всю шкалу вимірювань і бути максимально відтворюваним
- Повинен бути прямолінійним
- Бути максимально відтворюваним

Запитання: **25:** Які реакції частіше всього використовують у фотометрії?

- Утворення гетерополікислот
- Реакції нітрування; окислювально-відновні
- Комплексоутворення
- Утворення галогенних і роданідних комплексів

Запитання: **26:** Який з методів визначення фтористого водню і фторидів має найбільше переваг?

- З фторселективним електродом
- З церійалізаринкомплексом
- З цирконій-алізариновим комплексом
- З торій-тороновим комплексом

Запитання: **27:** Вкажіть область видимої частини спектра:

- 400620 нм
- 7503300 нм
- 150450 нм
- 400750 нм

Запитання: **28:** Яким приладом можна визначати оптичну густина безбарвного розчину?

- Спектрофотометром
- Полуміневим фотометром
- Фотоелектроколориметром
- Полярграфом

Запитання: **29:** Що є джерелом випромінення в ультрафіолетовій частині спектра?

- Лампа розжарювання
- Воднева або дейтерієва лампа
- Штифт Нернста
- Селітовий випромінювач

Запитання: **30:** Який із перерахованих методів є більш чутливий?

- Фотометричний
- Мають однакову чутливість
- ІЧ-спектроскопія
- Люмінесцентний

Завдання для підготовки до контрольної роботи №2

Задачі 1–4. Зробіть віднесення максимально можливого числа полос поглинання в спектрах вказаних сполук (рис. 1 - 4).

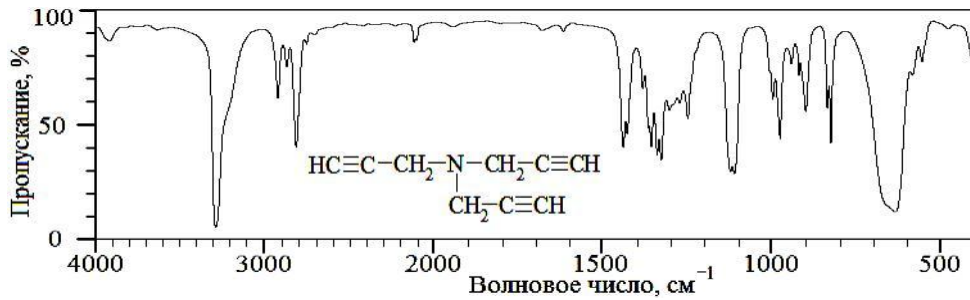


Рис. 1. Трипроп-2-ин-1-иламин ((HC≡C-CH₂)₃N):

ν , см⁻¹ (пропускание, %): 3932 (84), 3295 (4), 2928 (58), 2820 (38), 2123 (81), 1443 (38), 1360 (38), 1331 (33), 1126 (27), 1113 (26), 978 (42), 637 (11)

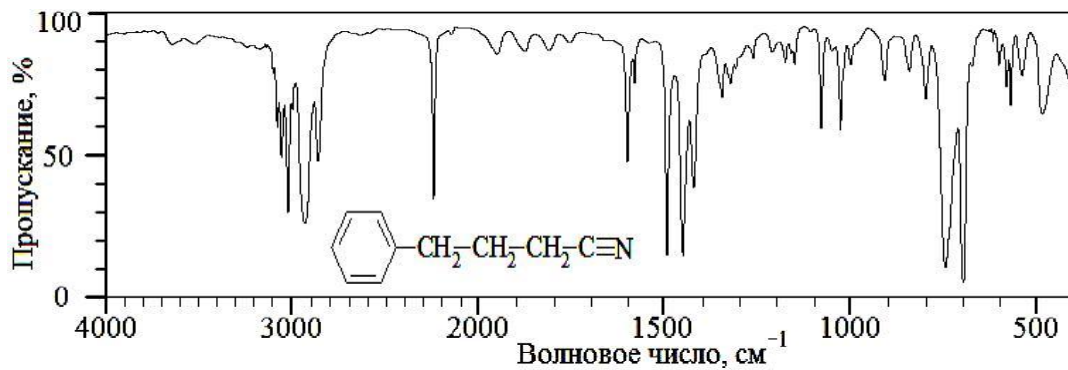


Рис. 2 4-Фенилбутаннитрил (C₆H₅(CH₂)₃C≡N):

ν , см⁻¹ (пропускание, %): 3085 (57), 3064 (47), 3028 (28), 2940 (24), 2924 (29), 2247 (33), 1603 (46), 1497 (13), 1454 (19), 1426 (36), 749 (10), 701 (4)

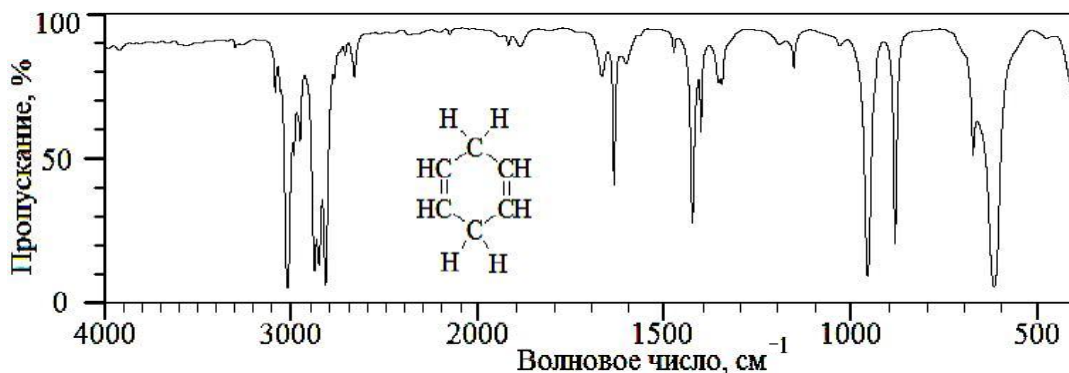


Рис. 3. Циклогекса-1,4-диен:

ν , см⁻¹ (пропускание, %): 3028 (4), 2884 (10), 2850 (12), 2824 (6), 1640 (38), 1430 (26), 960 (8), 886 (19), 621 (4)

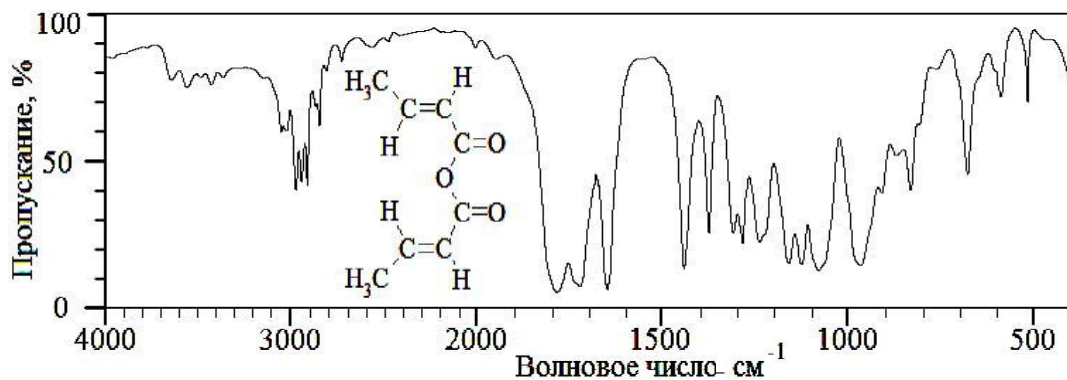
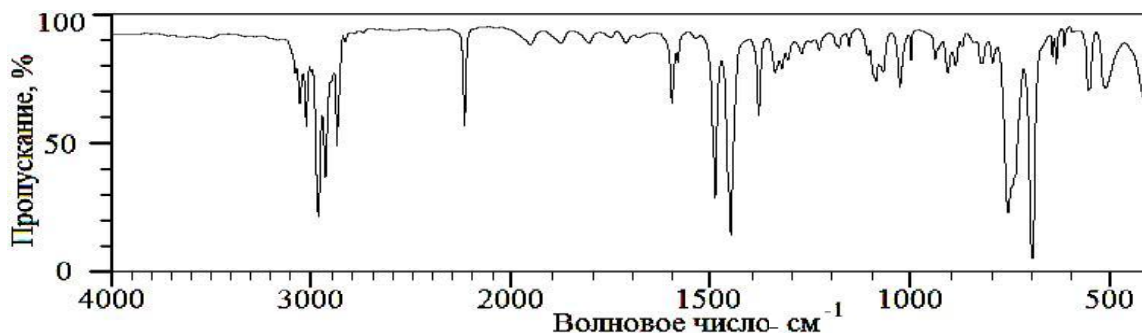


Рис. 4. Ангидрид *транс*-бут-2-еновой кислоты
 $((\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}-\text{C}(=\text{O}))_2\text{O})$:

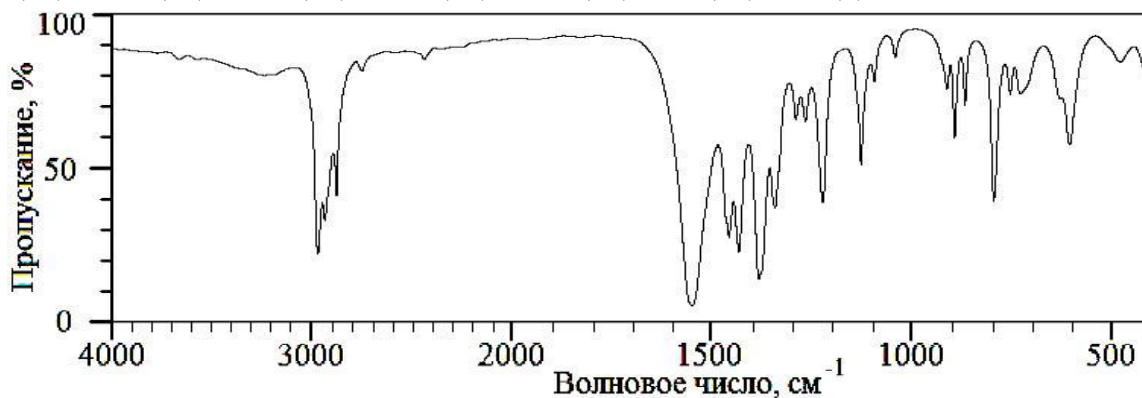
ν , cm^{-1} (пропускание, %): 3059 (57), 3028 (68), 2980 (38), 2950 (41), 2919 (39), 2875 (66), 2854 (58), 1796 (6), 1790 (4), 1739 (8), 1726 (6), 1652 (6), 1445 (12), 1378 (23), 1242 (21), 1164 (14), 1129 (13), 1083 (12), 969 (19)

Задачи 5–6. Визначте, до якої сполуки відноситься кожен спектр. Відповідь обґрунтуйте

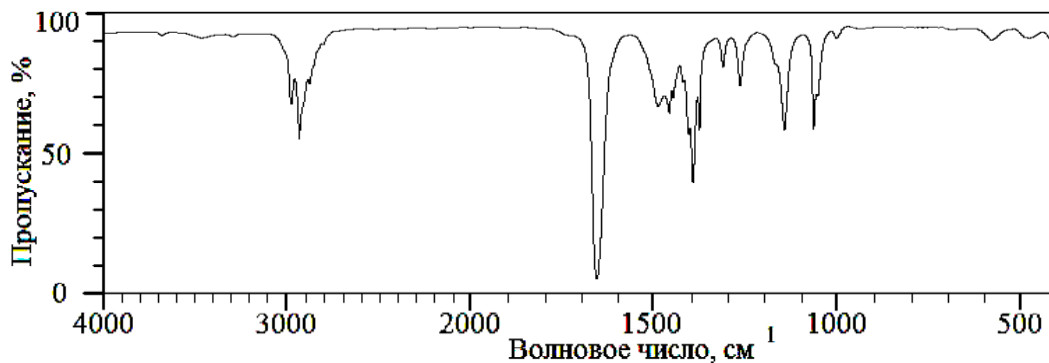
Задача 5. *N,N*-Диметилпропанаמיד ($\text{C}_2\text{H}_5-\text{CON}(\text{CH}_3)_2$); 2-фенілбутаннітрил ($\text{C}_2\text{H}_5(\text{C}_6\text{H}_5)\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$); 1-нітропропан (*n*- $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2$).



ν , cm^{-1} (пропускание, %): 3090 (74), 3032 (53), 2972 (20), 2937 (35), 2879 (46), 2241 (63), 1602 (62), 1493 (27), 1466 (13), 1384 (58), 750 (21), 699 (4)

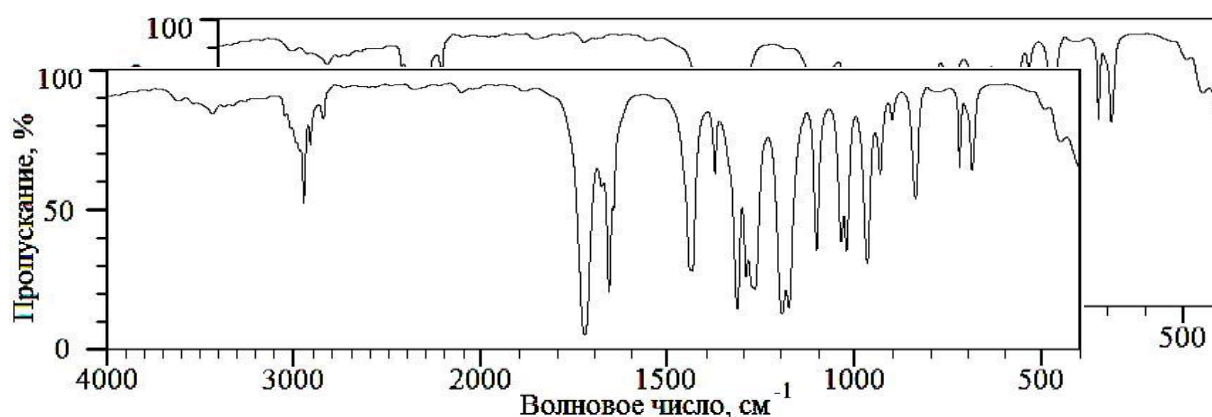


ν , cm^{-1} (пропускание, %): 2977 (21), 2942 (31), 2884 (39), 1553 (4), 1461 (26), 1437 (21), 1387 (15), 1347 (36), 1227 (37), 799 (37)

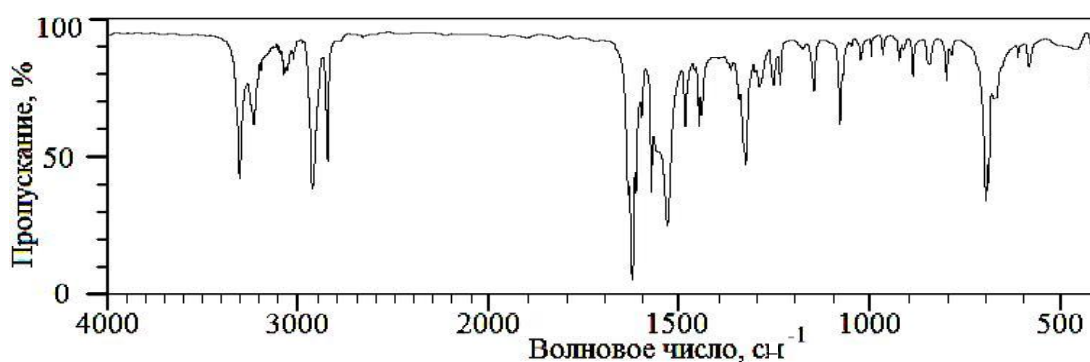


ν , cm⁻¹ (пропускание, %): 2983 (64), 2940 (53), 2882 (72), 1669 (4), 1492 (64), 1451 (66), 1409 (63), 1397 (37), 1380 (55), 1148 (55), 1068 (67)

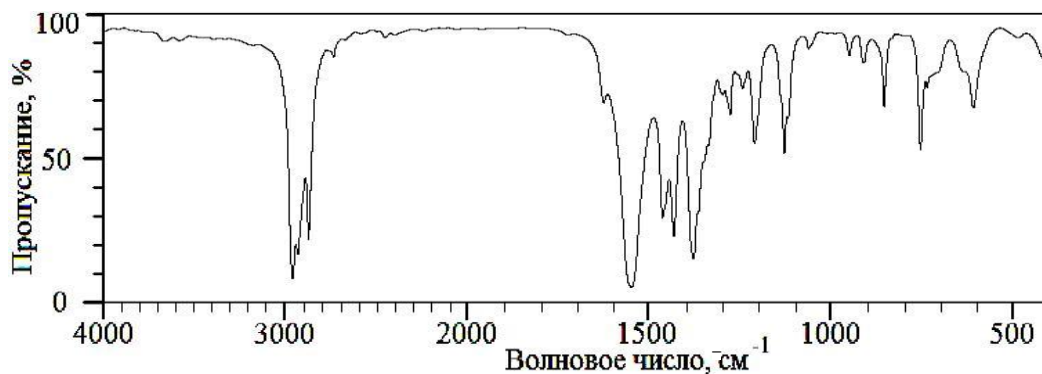
Задача 6. 1-Нитробутан (C₃H₇CH₂NO₂); метил-(2*E*)-бут-2-еноат ((2*E*)-CH₃CH=CHCO₂CH₃); *N*-циклогексилбензамид (C₆H₅CONH-*c*-C₆H₁₁).



ν , cm⁻¹ (пропускание, %): 3441 (81), 3057 (79), 2964 (60), 2920 (70), 2849 (79), 1726 (4), 1662 (19), 1446 (28), 1439 (26), 1378 (60), 1318 (13), 1296 (24), 1272 (20), 1199 (12), 1181 (13), 1106 (34), 1040 (37), 1026 (33), 971 (29)



ν , cm⁻¹ (пропускание, %): 3313 (39), 3241 (58), 3082 (77), 3066 (79), 2930 (36), 2862 (46), 1639 (34), 1628 (4), 1619 (36), 1604 (62), 1578 (35), 1536 (23), 1447 (62), 1331 (44), 701 (32), 693 (38)



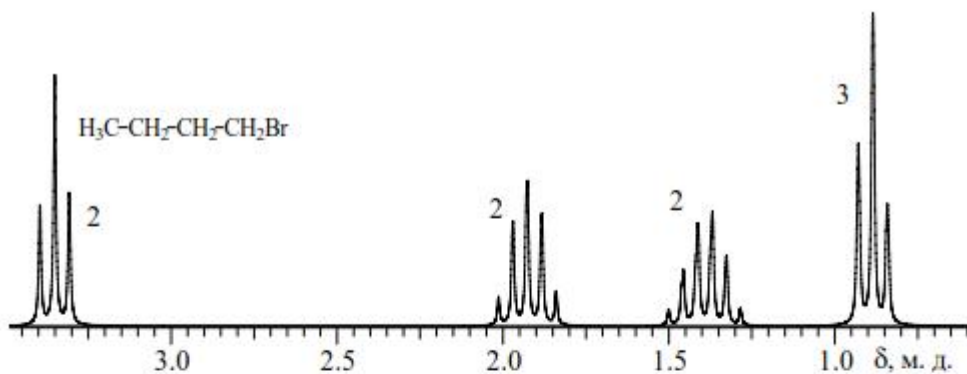
ν , cm^{-1} (пропускание, %): 2967 (7), 2938 (15), 2879 (20), 1629 (66), 1553 (4), 1468 (27), 1436 (21), 1382 (14), 1370 (29), 1214 (52), 1132 (49)

Задачи 7. Скільки сигналів і з яким співвідношенням інтенсивностей буде спостерігатися в спектрі ПМР для наступних сполук ?

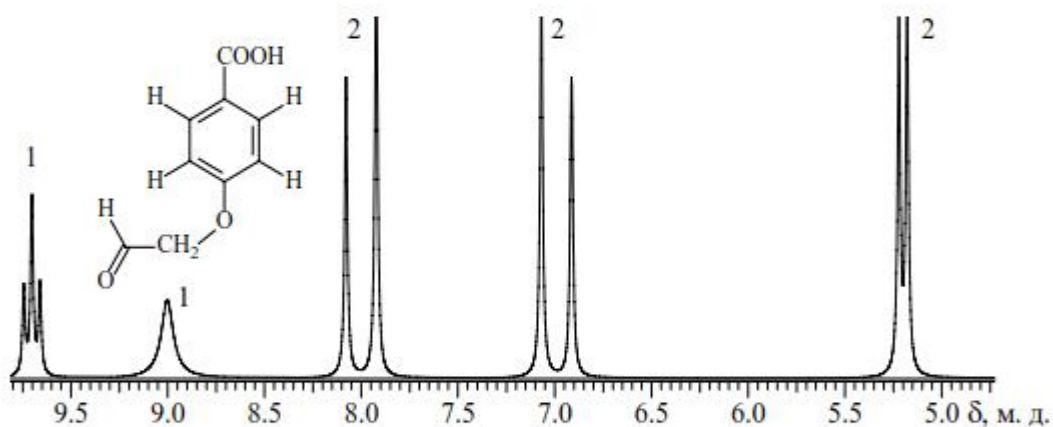
Задача	Название соединения	Задача	Название соединения
8.1	3-Гидроксипропаналь	8.11	Пропан-1-ол
8.2	Метилэтиловый эфир	8.12	Метилэтиламин
8.3	Гекс-1-ин	8.13	4-Нитроацетанилид
8.4	4-Метоксибензойная кислота	8.14	Ангидрид пропановой кислоты
8.5	Пентан-2-он	8.15	1-Хлорбутан
8.6	Бутановая кислота	8.16	Этилизопропиловый эфир
8.7	Метилпентаноат	8.17	2-Этоксиэтаналь
8.8	4-Аминобензальдегид	8.18	2-Метилпентан-3-он
8.9	Хлорангидрид 5-бромпентановой кислоты	8.19	Бензол-1,4-дикарбоновая кислота
8.10	Бутаналь	8.20	Пропен

Задачі 8-1 Зробіть віднесення сигналів в спектрі ПМР.

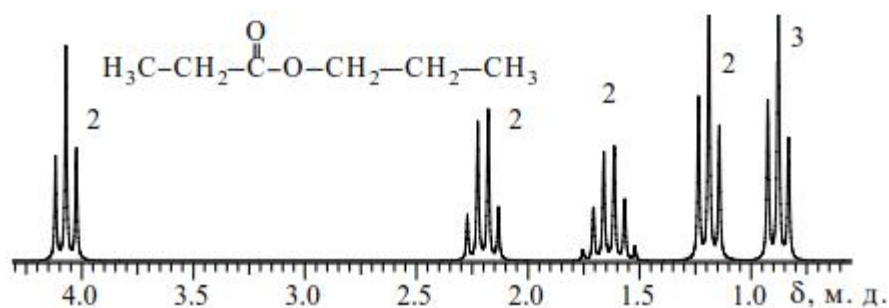
Задача 8 . 1-Бромбутан.



Задача 9 . 4-(2-Оксоетокси)бензойная кислота.



Задача 10 Пропилпропаноат.



Питання для підготовки до іспиту

Мас-спектрометрія

1. Основні принципи мас-спектрометрії та галузі її застосування. Одиниці виміру і форми представлення мас-спектрів. Принципова блок-схема мас-спектрометра.
2. Йонізація в мас-спектрометрі іелектронним ударом (ЕУ). Основні процеси, щовідбуваються при ЕУ.
3. Хімічна йонізація та області її аналітичного застосування.
4. Методи йонізації лабільних молекул (польовайонізація, польовадесорбція, FАВ, електроспрей-йонізація) та їх порівняння з методом ЕУ.
5. Основні методи аналізу йонів – магнітний, часопротітний, квадрупольний.
6. Типи йонів у мас-спектрі: молекулярний йон, уламкові йони, перегруповані, метастабільні, двозарядні та ізотопні йони.
7. Мас-спектроскопія високої роздільної здатності. Визначення брутоформули, виходячи з данихмас-спектрометрії: за допомогою точного значення маси молекулярного йону та з використанням таблиць Бейнона.
8. Основні правила розшифрування мас-спектрів (азотне правило, правила фрагментації йонів).
9. Характеристичні йони (на прикладі основних класів органічних сполук – вуглеводнів, галогенпохідних вуглеводнів, спиртів, етерів, альдегідів, кетонів, карбонових кислот, нітрилів, естерів, амінів, гетероциклічних сполук).
10. Найбільш характеристичні фрагментації молекулярних йонів з відщепленням нейтральних частинок. Перегрупування Мак-Лаферті.

ЯМР

1. Макроскопічна ядерна магніченість, залежність від температури та напруженості зовнішнього магнітного поля. Розподілення ядер між рівнями енергії в зовнішньому магнітному полі (розподілення Больцмана).
2. Вплив радіочастотного імпульсу на макроскопічну ядерну намагніченість. Спад вільної індукції (СВІ). Характеристики приладів ЯМР – чутливість та роздільна здатність, робоча частота.
3. Хімічне зміщення сигналу ЯМР, константа екранування ядер, діамагнітний та парамагнітний вклади в константу екранування. Еталонні речовини в спектроскопії ЯМР та вимоги до них, шкали хімічних змишень.
4. Залежність хімічного зсуву від будови речовин (на прикладі ^1H ЯМР та ^{13}C -ЯМР. Магнітно-анізотропні групи, їх вплив на навколишні ядра. Кільцеві ароматичні токи, їх вплив на резонанс навколишніх ядер.
5. Мультиплетність сигналів ЯМР. Правила розщеплення ЯМР сигналів першого порядку. Константи спин-спінової взаємодії (КССВ), їх класифікація в залежності від кількості зв'язків між магнітними ядрами.
6. Поняття про ізохронні, хімічно (не)еквівалентні, магнітно (не)еквівалентні ядра. ЯМР магнітних ядер в діастереотопних групах.

7. Спектроскопія ЯМР на ядрах ^{13}C . Порівняння з ^1H -ЯМР-спектроскопією. Методики зйомки спектрів на ядрах ^{13}C , особливості (в порівнянні зі спектрами на ядрах ^1H).

8. Спеціальні методики в ЯМР. Декаплінг. Ядерний ефект Оверхаузера. Подвійний резонанс, практичне використання в ЯМР

9. Поняття про двовимірну спектроскопію ЯМР. Принципова відмінність двовимірних спектрів ЯМР від одновимірних.

10. Типи двовимірних спектрів. Двовимірні кореляційні спектри: методики COSY, HSQC, HMBSC, NOESY, INADEQUATE. Способи зображення двовимірних спектрів.

ІЧ

1. Необхідні умови для виникнення ІЧ-спектру молекули. Поняття про валентні та деформаційні коливання.

2. Виникнення спектрів комбінаційного розсіювання (СКР) світла хімічних сполук. Необхідні умови.

3. Порівняння можливостей методів ІЧ-спектроскопії та СКР для вивчення хімічних сполук.

4. Коливання двохатомних молекул у наближенні гармонічного осцилятора.

5. Поняття про нормальні коливання та їх форми.

6. Силова стала та її фізичне тлумачення.

7. Залежність положення смуги поглинання карбонільної групи від замісників біля sp^2 -гібридизованого атома карбону.

8. Особливості поглинання 1,2-, 1,3-та 1,4-дикарбонільних сполук.

9. Вплив концентрації гідроксилвмісних сполук на вигляд спектру.

10. Наведіть критерії розрізнення алканів, алкенів, алкінів, аренів за ІЧ-спектрами.

11. Вплив структурних факторів на положення та інтенсивність смуги поглинання подвійних і потрійних зв'язків у вуглеводнях.

12. Залежність положення смуги поглинання від кратності зв'язку на прикладі вуглеводнів.

13. Залежність положення смуги поглинання від кратності зв'язку на прикладі карбонільних сполук.

14. Фактори, що впливають на інтенсивність смуги поглинання. Навести приклади.

15. Залежність інтенсивності смуги поглинання від кратності зв'язку.

16. Особливості поглинання амідів карбонових кислот.

17. Використання різних ізотопів для вирішення структурно-спектральних проблем.

18. Поглинання амінів, амідів та нітрילів.

19. Особливості поглинання амінокислот. Пептидний зв'язок.

УФ

1. Детермінація поняття електронна спектроскопія. Електромагнітний спектр поглинання та його ділянки. Діапазон спектру, що відповідає за електронні переходи.

2. Фізична природа забарвлення речовини. Основні та додаткові кольори. Природа УФ та видимого спектру.
3. Молекулярні орбіталі на прикладі етилену, бутадієну, формальдегіду. ВЗМО та НВМО. Довгохвильовий електронний перехід. Поняття про π - π^* та n - π^* переходи.
4. Основні закони поглинання оптичного випромінювання: закон Бугера-Ламберта, закон Бера та об'єднаний закон Бугера-Ламберта-Бера.
5. Флуоресценція та фосфоресценція. Дзеркальна симетрія спектрів поглинання та люмінесценції. Стоксів зсув. Діаграма Яблонського. Типи електронних переходів. Поняття про синглетний і триплетний стани. Коливальна релаксація. Внутрішня та інтеркомбінаційна конверсія.
6. Аналіз двокомпонентних сумішей. Аналіз кето-енольної рівноваги. Порівняння з використанням спектрів ПМР. Чутливість електронної спектроскопії.
7. Сольватохромія. Хромофори та ауксохроми. Залежність між кольором та будовою сполуки. Батохромний та гіпсохромний зсув.
8. Електронні спектри основних класів органічних сполук. Спряжені полієнові системи. Правила Фізера - Вудворда та Фізера - Куна.
9. Ароматичні сполуки. Бензол та його похідні. Лінійні та ангулярні конденсовані ароматичні сполуки. Гетероциклічні ароматичні сполуки.
10. Ціанінові барвники. Приклади.

Приклад екзаменаційного білета

ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ №

1. Типи йонів у мас-спектрі: молекулярний йон, уламкові йони, перегруповані, метастабільні, двозарядні та ізотопні йони.

2. Спектроскопія ЯМР: види, характеристики, спектри, можливості метода.

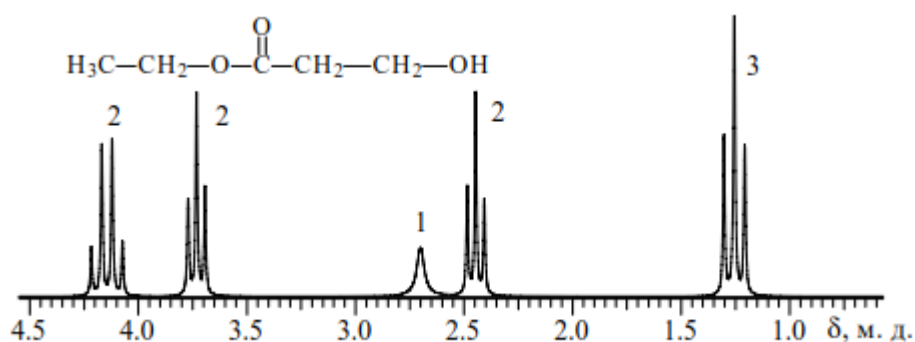
3 Скільки сигналів і з яким співвідношенням інтенсивностей буде спостерігатися в спектрі ПМР для наступних сполук:

а) 4-Метоксибензойная кислота;

б) Пропан-1-ол;

в) Гекс-1-ин.

4 Зробіть віднесення сигналів в спектрі ПМР.



5 Визначте відповідність між спектром ПМР та сполукою:

Гідроксибензальдегід та гексан-2, 5-діон

