

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
органической химии



Шихалиев Х.С.  
подпись, расшифровка подписи  
26.04.2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.ДВ.03.02 Методы исследования реакционной способности органических соединений**

*Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом*

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.03.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация:

Теоретическая и экспериментальная химия

3. Квалификация выпускника: бакалавр

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: кафедра органической химии

6. Составители программы: Крысин Михаил Юрьевич, д.х.н., доцент

*(ФИО, ученая степень, ученое звание)*

7. Рекомендована:

Научно-методическим Советом химического факультета, 25.04.2023, протокол №4  
*(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,*

*отметки о продлении вносятся вручную)*

8. Учебный год: 2025-2026

Семестр(ы): 6

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целью освоения учебной дисциплины является:

на основе современных представлений в области физико-химических методов анализа веществ формирование у студентов понимания основ и практического применения комплексных спектральных (ИК-, ЯМР) и масс-спектрометрических методов для установления структуры органических соединений

Задачи учебной дисциплины:

студенты должны знать физические основы ИК-, ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии, понимать взаимосвязь спектральных данных и строения органических соединений для установления их структуры.

## 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

### Вариативная часть блока Б1

Изучение названного курса предполагает, что студент владеет знаниями дисциплин базового профессионального цикла: физика; химия.

## 11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК -1	Способен осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции	ПК -1.1	Выполняет стандартные операции на высокотехнологичном оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства	<b>Знать:</b> теоретические основы комплекса современных методов анализа для оценки и подтверждения структуры объектов исследования; <b>Уметь:</b> организация и практическое проведение мероприятий по стандартизации веществ и материалов (сбор, анализ и обработка научно-технической информации, необходимой для решения задач, поставленных специалистом более высокой квалификации);
		ПК -1.2	Составляет протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе	<b>Владеть:</b> навыками сбора, анализа и обработки научно-технической информации, приемами метрологического обеспечения мероприятий по стандартизации веществ и материалов.
ПК -3	Способен использовать современные экспериментальные и расчетно-теоретические методы для установления структуры и исследования реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК -3.1	Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры химических соединений	<b>Знать:</b> современные экспериментальные и расчетно-теоретические методы для установления состава и структуры органических соединений. <b>Уметь:</b> использовать на практике современные методы физико-химического анализа для установления состава и структуры органических соединений.
		ПК -3.2	Способен изучать реакционную способность химических соединений с применением типовых экспериментальных и расчетно-теоретических методов	<b>Владеть:</b> базовыми навыками использования современной аппаратуры и обработки данных при проведении научных исследований

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. (в соответствии с учебным планом) — 2/72.

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) зачет с оценкой

### 13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
			6 семестр
Аудиторные занятия		54	54
в том числе:	лекции	36	36
	практические	18	18
	лабораторные		
Самостоятельная работа		18	18
Форма промежуточной аттестации (зачет с оценкой)			
Итого:		72	72

#### 13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
<b>1. Лекции</b>			
1.1	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	Физические основы ЯМР. Магнитные ядра. Параметры спектров ЯМР (химический сдвиг, интенсивность сигнала, константа спин-спинового взаимодействия). Подготовка образцов, условия съемки спектров.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
1.2	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	Факторы, определяющие химический сдвиг: электронное влияние заместителей, влияние полей магнитно-анизотропных групп, взаимодействие магнитных ядер и электронов через пространство, влияние растворителей и температуры. Прямое и не прямое спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР <sup>1</sup> H. Константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Взаимосвязь КССВ и структуры органических соединений. ЯМР <sup>1</sup> H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Спектроскопия ЯМР <sup>13</sup> C.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
1.3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	Гомо- и гетероядерные ЯЭО. Применение ЯЭО для установления структуры веществ. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
1.4	Основные принципы масс-спектрометрии	Методы и системы ввода образцов. Методы ионизации. Ионизация в газовой фазе.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view">https://edu.vsu.ru/course/view</a>

		Десорбционная ионизация. Ионизация при испарении: масс-спектрометрия с термораспылением, масс-спектрометрия с электрораспылением. Анализаторы масс. Магнитные секторные масс-спектрометры. Квадрупольные масс-спектрометры. Масс-спектрометры с ионной ловушкой. Времяпролетные масс-спектрометры. Tandemная масс-спектрометрия.	.php?id=17556
1.5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Прочность химических связей. Фрагментации. Перегруппировки. Молекулярный ион. Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды, гидроксилсодержащие соединения, оксосоединения, карбоновые кислоты и их производные, органические соединения азота, гетероциклические соединения).	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
1.6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	Газовая хроматография/масс-спектрометрия. Типы хроматограмм с регистрацией ионного тока. Скорость сбора данных. Количественный анализ. Жидкостная хроматография//масс-спектрометрия. Типы масс-спектрометров. Анализ объектов окружающей среды.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
1.7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной ненасыщенности. Азотное правило. Определение содержания изотопа $^{13}\text{C}$ в природных образцах. Расчет изотопной чистоты соединений. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в масс-спектрах. Библиотеки масс-спектров.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
<b>2. Практические занятия</b>			
2.1	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	Физические основы ЯМР. Магнитные ядра. Параметры спектров ЯМР (химический сдвиг, интенсивность сигнала, константа спин-спинового взаимодействия). Подготовка образцов, условия съемки спектров.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
2.2	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	Факторы, определяющие химический сдвиг: электронное влияние заместителей, влияние полей магнитно-анизотропных групп, взаимодействие магнитных ядер и электронов через пространство, влияние растворителей и температуры. Прямое и не прямое спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР $^1\text{H}$ . Константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Взаимосвязь КССВ и структуры органических соединений. ЯМР $^1\text{H}$ спектроскопия отдельных классов органических соединений. Спектроскопия ЯМР $^{13}\text{C}$ .	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
2.3	Ядерный эффект Оверхаузера и	Гомо- и гетероядерные ЯЭО. Применение ЯЭО для установления структуры веществ.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>

	корреляционная спектроскопия ЯМР	Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.	.php?id=17556
2.4	Основные принципы масс-спектрометрии	Методы и системы ввода образцов. Методы ионизации. Ионизация в газовой фазе. Десорбционная ионизация. Ионизация при испарении: масс-спектрометрия с термораспылением, масс-спектрометрия с электрораспылением. Анализаторы масс. Магнитные секторные масс-спектрометры. Квадрупольные масс-спектрометры. Масс-спектрометры с ионной ловушкой. Времяпролетные масс-спектрометры. Тандемная масс-спектрометрия.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
2.5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Прочность химических связей. Фрагментации. Перегруппировки. Молекулярный ион. Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды, гидроксилсодержащие соединения, оксосоединения, карбоновые кислоты и их производные, органические соединения азота, гетероциклические соединения).	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
2.6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	Газовая хроматография/масс-спектрометрия. Типы хроматограмм с регистрацией ионного тока. Скорость сбора данных. Количественный анализ. Жидкостная хроматография//масс-спектрометрия. Типы масс-спектрометров. Анализ объектов окружающей среды.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>
2.7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной ненасыщенности. Азотное правило. Определение содержания изотопа <sup>13</sup> C в природных образцах. Расчет изотопной чистоты соединений. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в масс-спектрах. Библиотеки масс-спектров.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17556</a>

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				Всего
		Лекции	Практически е	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	4	2		6	12
2	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	6	4		2	12
3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	4	4		2	10
4	Основные принципы	4	2		2	8

	масс-спектрометрии					
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	6	2		2	10
6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	6	2		2	10
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	2	2		2	6
	Итого:	36	18		18	72

#### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Организация изучения дисциплины предполагает следующие виды работ студентов: с конспектами лекций; выполнение заданий преподавателя при подготовке к занятиям по наиболее сложным разделам дисциплины с использованием основной и дополнительной литературы, а также интернет-ресурсов.

##### Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа как форма организации учебной работы предусматривает следующие ее виды:

- повторение лекционного материала;
- изучение учебной, учебно-методической литературы и иных источников по инструментальным методам анализа и их применению;
- подготовка к зачету с оценкой.

Цель самостоятельной работы – это углубление и расширение знаний в области физико-химических методов анализа органических веществ; формирование навыка и интереса к самостоятельной познавательной деятельности, что послужит в будущем основанием для написания выпускной квалификационной работы.

В процессе изучения курса необходимо обратить внимание на самоконтроль знаний. С этой целью обучающийся после изучения каждой отдельной темы и затем всего курса по учебнику и дополнительной литературе должен проверить уровень своих знаний с помощью контрольных вопросов, которые помещены в конце каждой темы.

Для самостоятельного изучения отводятся темы, хорошо разработанные в учебных пособиях, научных монографиях и не могут представлять особенных трудностей при изучении.

Самостоятельная работа реализуется: непосредственно в процессе аудиторных занятий на кафедре при выполнении лабораторных работ; в библиотеке, дома.

##### Методические рекомендации по подготовке к зачету с оценкой

При подготовке к зачету с оценкой обучающийся должен повторить пройденный материал в соответствии с учебной программой, примерным перечнем учебных вопросов, выносящихся на зачет и содержащихся в данной программе, используя конспект лекций и рекомендованную литературу. При необходимости может обратиться за консультацией и методической помощью к преподавателю.

**15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины** (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Ярышев, Н. Г. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе : учебное пособие / Н. Г. Ярышев, Ю. Н. Медведев, М. И. Токарев, А. В. Бурихина, Н. Н. Камкин - Москва : Прометей, 2015. - 196 с. - ISBN 978-5-9906134-6-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785990613461.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785990613461.html</a>
2	Бёккер, Ю. Спектроскопия : руководство / Ю. Бёккер. — Москва : Техносфера, 2009. — 528 с. — ISBN 978-5-94836-220-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/73013">https://e.lanbook.com/book/73013</a>
3	Лебедев, А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии : учебное пособие / А. Т. Лебедев. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Техносфера, 2015. — 704 с. — ISBN 978-5-94836-409-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/110953">https://e.lanbook.com/book/110953</a>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4	Лефедова, О. В. Молекулярная спектроскопия : учеб. -метод. пособие / Лефедова О. В. - Иваново : Иван. гос. хим. -технол. ун-т. , 2016. - 95 с. - ISBN --. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ghtu_010.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ghtu_010.html</a>
5	Юровская, М. А. Основы органической химии : учебное пособие / М. А. Юровская, А. В. Куркин. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 239 с. — ISBN 978-5-00101-757-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/135515">https://e.lanbook.com/book/135515</a>
6	Сафиулина, А. Г. Теоретические методы исследования продуктов органического синтеза : учебное пособие / А. Г. Сафиулина, Р. Г. Тагашева - Казань : Издательство КНИТУ, 2018. - 88 с. - ISBN 978-5-7882-2406-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788224060.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788224060.html</a>
7	Филатова, Е. А. Функционализация органических соединений : учебное пособие / Е. А. Филатова. - Ростов н/Д : ЮФУ, 2020. - 167 с. - ISBN 978-5-9275-3498-2. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927534982.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927534982.html</a>

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)\*:

№ п/п	Ресурс
8	Сайт Зональной Научной библиотеки Воронежского государственного университета. — Режим доступа: <a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a>
9	ЭБС «Университетская библиотека online», <a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a>
10	ЭБС «Консультант студента», <a href="http://www.studmedlib.ru">http://www.studmedlib.ru</a>
11	Электронно-библиотечная система "Лань" <a href="https://e.lanbook.com/">https://e.lanbook.com/</a>

**16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы** (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Задачник по ИК- и ЯМР-спектроскопии лекарственных препаратов и биологически активных соединений : учебное пособие / А. А. Бакибаев, С. Ю. Паньшина, О. В. Пономаренко [и др.]. — Томск : ТГУ, 2019. — 124 с. — ISBN 978-5-94621-810-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/148676">https://e.lanbook.com/book/148676</a>

**17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ,**

### **электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):**

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ) в части освоения лекционного материала, проведения текущей и промежуточной аттестации, проведения части лабораторных работ и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для электронного обучения (ЭО) (п. 15).

Для достижения цели освоения учебной дисциплины, повышения качества образования и формирования компетенций используются аудиторные (лекции, лабораторные) и внеаудиторные/интерактивные (самостоятельная работа студентов) формы обучения.

#### *Аудиторные:*

Основными видами аудиторной работы являются лекции и лабораторные работы. Они решают задачи формирования и развития профессиональных умений и навыков обучающихся.

*Лекции* включают в себя последовательное изложение материала преподавателем в том числе с использованием мультимедийного проектора для компьютерной презентации и видеоматериалов.

*Лабораторные работы* – форма организации обучения, интегрирующая теоретико-методологические знания, практические умения и навыки студентов в едином процессе учебно-исследовательского характера.

В ходе выполнения лабораторных работ студенты вырабатывают умения анализировать, делать выводы и обобщения, пользоваться различными приемами измерений, спектральными методами анализа, оформлять результаты экспериментов. Формируются практические профессиональные навыки спектрального анализа органических соединений.

#### *Внеаудиторные:*

Работа в глобальной сети (использование Интернет-технологий), поиск научной и методической информации.

### **18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

Специализированная мебель, шкаф вытяжной, лабораторные приборы, оборудование, посуда для синтеза и исследования органических соединений, аквадистиллятор ДЭ-10, баня водяная LB-140, весы аналитические HTR-220 CE Shinko VIBRA, комплекс для испарения жидкостей, микроскоп медицинский Биомед-6 (трино), цифровая камера ТС-1.3, рефрактометр ИРФ-454 Б2М, принтер лазерный Samsung ML-1641, ноутбук, ГХ-масс-спектрометр, ВЭЖХ-масс-спектрометр

### **19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций**

По решению кафедры оценки за зачет могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре, но не ранее, чем на заключительном занятии. При несогласии студента с оценкой последний вправе сдавать экзамен/зачет на общих основаниях.

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:



№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	ПК-1	ПК-3.1 ПК-1.2	Устный опрос
2.	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	ПК-1 ПК-3	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос; контрольная работа
3.	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	ПК-1 ПК-3	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос
4.	Основные принципы масс-спектрометрии	ПК-1 ПК-3	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос;
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	ПК-3	ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос
6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	ПК-3	ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос;
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	ПК-3	ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос, контрольная работа
Промежуточная аттестация форма контроля - зачет с оценкой				Перечень вопросов

## 20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

### 20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Практические занятия

#### Перечень тем практических занятий:

«Практические основы пробоподготовки и регистрации ЯМР спектров»

«Определение наличия функциональных групп в структуре органических соединений по ЯМР спектрам»

«Определение структуры органических веществ по данным ЯМР спектроскопии. Решение задач»

«Расчет химических сдвигов по инкрементам. Расшифровка ЯМР  $^1\text{H}$  спектров первого порядка.»

- «Расшифровка спектров ЯМР  $^1\text{H}$  высшего порядка.»
- «Использование компьютерных программ, моделирующих ЯМР спектры»
- «Установление брутто-формулы соединения, исходя из интенсивностей изотопных пиков молекулярного иона»
- «Установление по масс-спектру структурной формулы соединения. Фрагментация органических соединений»
- «Анализ и мониторинг состава смесей органических соединений методом хромато-масс-спектрометрии»

#### Описание технологии проведения

Практические занятия включают самостоятельную проработку теоретического материала обучающимся, изучение методик проведения и планирование эксперимента, инструментальных методов, обработку и интерпретацию экспериментальных данных.

По результатам практического занятия обучающийся должен уметь объяснять цели, задачи, ход проведения работы, ее результаты, сделанные выводы.

#### Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

##### Критерии оценки выполнения практического задания

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся владеет теоретическими основами методов анализа, практическое задание выполнено, сделаны правильные наблюдения и выводы (допускаются некоторые малозначительные ошибки, которые студент обнаруживает и быстро исправляет самостоятельно или при помощи преподавателем), что соответствует освоению компетенций.	Повышенный уровень Базовый уровень Пороговый уровень	Зачтено
Обучающийся не знает методики выполнения практической работы и ее теоретических основ, не может самостоятельно провести исследование, делает грубые ошибки в интерпретации полученных результатов, не может сформулировать выводы, оформить работу, что соответствует не освоению компетенций.	–	Не зачтено

## 20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

#### Собеседование по билетам к зачету с оценкой

##### Перечень вопросов к зачету с оценкой:

1. Физические основы ЯМР. Магнитные ядра. Параметры спектров ЯМР (химический сдвиг, интенсивность сигнала, константа спин-спинового взаимодействия). Подготовка образцов, условия съемки спектров.
2. Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной ненасыщенности.
3. Факторы, определяющие химический сдвиг.
4. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в масс-спектрах.
5. Прямое и не прямое спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$ . Константы спин-спинового взаимодействия (КССВ).
6. Методы и системы ввода образцов. Методы ионизации. Ионизация в газовой фазе. Десорбционная ионизация. Ионизация при испарении: масс-спектрометрия с термораспылением, масс-спектрометрия с электрораспылением.
7. ЯМР  $^1\text{H}$  спектроскопия отдельных классов органических соединений. Углеводороды.
8. Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Прочность химических связей. Фрагментации. Перегруппировки.
9. Спектроскопия ЯМР  $^{13}\text{C}$ .

10. Анализаторы масс. Магнитные секторные масс-спектрометры. Квадрупольные масс-спектрометры. Масс-спектрометры с ионной ловушкой. Времяпролетные масс-спектрометры. Тандемная масс-спектрометрия.
11. Гомо- и гетероядерные ЯЭО.
12. Газовая хроматография/масс-спектрометрия. Типы хроматограмм с регистрацией ионного тока.
13. ЯМР <sup>1</sup>H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Функциональные производные углеводов.
14. Жидкостная хроматография//масс-спектрометрия. Типы масс-спектрометров. Анализ объектов окружающей среды.
15. Взаимосвязь КССВ и структуры органических соединений.
16. Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды).
17. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.
18. Масс-спектры основных классов органических соединений (гидроксилсодержащие соединения).
19. Применение ЯЭО для установления структуры веществ.
20. Масс-спектры основных классов органических соединений (оксосоединения).

#### Описание технологии проведения

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний, позволяющие оценить степень сформированности умений.

#### Технология проведения зачета с оценкой

1. Выдача билетов к зачету с оценкой и чистых листов ответов. (Билеты к зачету с оценкой выдаются обучающимся индивидуально).
2. Фиксирование времени начала и доведение до студентов времени окончания зачета с оценкой.
3. Ответы обучающихся на билеты к зачету с оценкой в письменном виде с заполнением листов ответов. (При необходимости в них кроме текста приводятся рисунки, схемы, таблицы, диаграммы).
4. Сбор билетов к зачету с оценкой и листов ответов.
5. Проверка листов ответов и выставление оценок.

Во время зачета с оценкой обучающимся запрещается разговаривать, ходить по аудитории, пользоваться сотовыми телефонами, шпаргалками, конспектами, учебниками и другой учебно-методической литературой, а также вносить пометки в экзаменационные билеты. Студенты, нарушившие перечисленные требования, удаляются с зачета с оценкой.

#### Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

При оценивании результатов обучения на зачете с оценкой используются следующие показатели:

- 1) знание учебного материала дисциплины;
- 2) умение применять теоретические знания для решения практических задач;
- 3) владение теоретическими основами дисциплины, способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения **на зачете с оценкой** используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Показатели достижения заданного уровня освоения компетенции:

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
---------------------------------	--------------------------------------	--------------

Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом дисциплины, но допускает отдельные ошибки при ответах на вопросы.	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, не умеет применять теоретические знания для решения практических задач.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Неудовлетворительно

**Варианты заданий для контрольной работы:**

**1. ЯМР расшифровывается как:**

- ядерный магнитный резонанс
- ядерный молекулярный резонанс
- ядерный магнитный ренесанс

**2. Химический сдвиг - это:**

- сдвиг атома под действием химии
- смещение частоты проявления ядра под действием химического окружения
- медицинский термин

**3. Количественная характеристика спин-спинового взаимодействия:**

- дельта
- переменная
- константа

**4. Единица измерения химического сдвига, независящая от частоты:**

- Гц
- м.д.
- нм

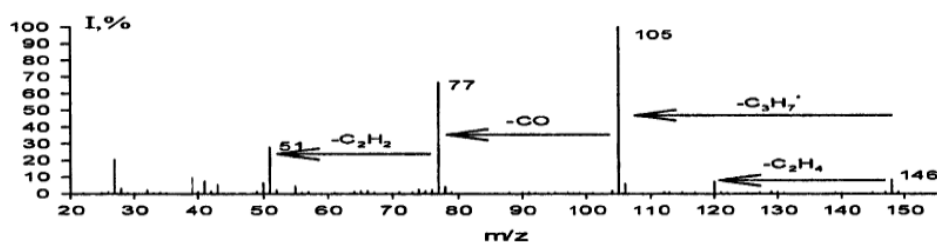
**5. Мультиплетность сигнала метильной группы в составе этильного заместителя:**

- синглет
- дублет
- триплет

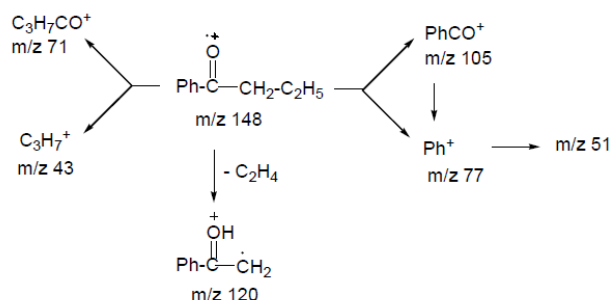
**6. Мультиплетность сигналов протонов в составе фрагмента –O–CH(Cl)–CH<sub>2</sub>–NO<sub>2</sub>:**

- триплет, триплет
- триплет, дублет
- синглет, синглет

Составьте схему фрагментации бутирофенона, масс-спектр которого представлен ниже.



Ответ: Схема фрагментации бутирофенона



#### Описание технологии проведения контрольной работы

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей аттестации.

Билет с заданиями контрольной работы обучающийся выбирает из числа предложенных и перед ответом ему предоставляется время для подготовки, обычно 40-45 мин.

#### Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Для оценивания результатов контрольной работы используется шкала: «зачтено», «не зачтено».

Оценка	Критерии оценок
<b>Зачтено</b>	При решении заданий контрольной работы продемонстрировано знание теоретических основ дисциплины, умение применять теоретические знания для решения практических задач.
<b>Не зачтено</b>	При решении заданий контрольной работы студент демонстрирует отсутствие знаний теоретических основ дисциплины, он не может применить полученные теоретические знания для решения задач.

Для проведения диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения дисциплины «Методы и технические средства для испытания органических соединений практического назначения» рекомендуются следующие задания.

**Тесты с выбором правильного ответа из предложенных возможных.**

1. МЕТОД ЯМР ...

- 1) основан на анализе спектров люминесценции в процессе ЯМР
- 2) используют для анализа веществ, в структуре которых имеются атомы с ядрами с нечетным числом протонов
- 3) основан на взаимодействии веществ с электромагнитным излучением в микроволновом диапазоне
- 4) используют для анализа веществ, в структуре которых имеются атомы с ядрами, обладающими спиновым числом, отличным от 0.

2. В СПЕКТРЕ ЯМР  $^1\text{H}$  МУЛЬТИПЛЕТНОСТЬ СИГНАЛОВ ПРОТОНОВ МЕТИЛЕНОВЫХ ГРУПП В СТРУКТУРЕ  $\text{X}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{Y}$

- 1) дублет, дублет
- 2) квартет, дублет
- 3) триплет, триплет
- 4) триплет, синглет

3. В ИК-СПЕКТРАХ ЧИСЛО И ИНТЕНСИВНОСТЬ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП ЗАВИСИТ ОТ

- 1) возможности образования межмолекулярных водородных связей
- 2) гибридизации C-атома, связанного с OH-группой
- 3) влиянием соседних групп
- 4) функциональными особенностями OH-группы

4. В ИК-СПЕКТРАХ ПЕРВИЧНЫХ АМИНОВ В РАЗБАВЛЕННЫХ РАСТВОРАХ ЧИСЛО ПОЛОС ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ N-H РАВНО

- 1) 2
- 2) 1
- 3) 4
- 4) 3

5. В МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ СТРУКТУРА КЛАСТЕРА ПИКОВ В ОБЛАСТИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА ОБУСЛОВЛЕНА

- 1) зарядом иона
- 2) массой изотопа
- 3) изотопным составом элементов, входящих в структуру органического соединения
- 4) положением элемента в Периодической системе

**Тесты без предложенных возможных вариантов ответа**

1. В ИК-СПЕКТРОСКОПИИ КОЛЕБАНИЯ АТОМНОЙ ГРУППИРОВКИ, ДЛЯ КОТОРОЙ СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ СВЯЗЕЙ ИЛИ МАССЫ СИЛЬНО ОТЛИЧАЮТСЯ ОТ ОСТАЛЬНОЙ ЧАСТИ МОЛЕКУЛЫ НАЗЫВАЮТСЯ \_\_\_\_\_
2. ПРИ ПОГЛОЩЕНИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРОИСХОДЯТ ИЗМЕНЕНИЯ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ \_\_\_\_\_
3. В ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ СОПРЯЖЕННЫХ ФРАГМЕНТОВ ПО СРАВНЕНИЮ С НЕСОПРЯЖЕННЫМИ, КАК ПРАВИЛО \_\_\_\_\_
4. МЕТОД МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ОСНОВАН НА \_\_\_\_\_
5. В ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ РАСЩЕПЛЕНИЕ СИГНАЛОВ В МУЛЬТИПЛЕТЫ ОБУСЛОВЛЕНО ВЛИЯНИЕМ \_\_\_\_\_