

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
органической химии

X. Шихалиев  
(X.C. Шихалиев)

31.08.2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.09 ЯМР и ХМС методы в органической химии**

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**  
04.05.01
- 2. Профиль подготовки/специализация:** фундаментальная и прикладная химия
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** специалист
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра органической химии
- 6. Составители программы:** Крысин Михаил Юрьевич, доктор химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** научно-методическим советом химического факультета, протокол № 6 от 24.05.2018
- 8. Учебный год:** 2018-2019

**Семестр(ы):** 9

### 9. Цели и задачи учебной дисциплины:

на основе современных представлений в области физико-химических методов анализа веществ сформировать у студентов понимание основ и практического применения ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии в анализе органических соединений.

### 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина относится к вариативной части, обязательные дисциплины.

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

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	<b>знать:</b> основные параметры спектров ЯМР $^1\text{H}$ , классификацию спиновых систем, способы упрощения сложных спектров; <b>уметь:</b> анализировать закономерности масс-спектрометрического распада молекулярных ионов; <b>владеть:</b> проведением комплексного исследования органических веществ с применением физико-химических методов
ОПК-2	Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<b>знать:</b> основные требования к образцам для спектральных исследований; <b>уметь:</b> проводить подготовку образцов для спектральных исследований; <b>владеть:</b> методиками обработки спектральных данных
ОПК-5	Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений	<b>знать:</b> основные взаимосвязи структуры органических соединений и спектральных данных; <b>уметь:</b> Проводить поиск, обработку и анализ спектральных данных различных классов органических соединений; <b>владеть:</b> навыками описания спектров и формулировки предложений о структуре органических соединений
ПК-3	Владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания	основные принципы устройства спектрометров; <b>уметь:</b> выбирать режимы регистрации спектров; <b>владеть:</b> методиками обработки спектральных данных

### 12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 5/180.

Форма промежуточной аттестации – зачет с оценкой

### 13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	9 семестр
Аудиторные занятия	102	102
в том числе: лекции	30	30
практические	-	-
лабораторные	60	60
Самостоятельная работа и контроль	90	90
Итого:	180	180
Форма промежуточной аттестации		Зачет с оценкой

#### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<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.
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 косвенное спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР $^1\text{H}$ . Константы спин-спинового взаимодействия (KССВ). Взаимосвязь KССВ и структуры органических соединений. ЯМР $^1\text{H}$ спектроскопия отдельных классов органических соединений. Спектроскопия ЯМР $^{13}\text{C}$ .
1.3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	Гомо- и гетероядерные ЯЭО. Применение ЯЭО для установления структуры веществ. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.
1.4	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.
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).
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.
1.7	Практические основы	Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и

	интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	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.
<b>2. Лабораторные 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.
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 $^{13}\text{C}$ .
2.3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	Гомо- и гетероядерные ЯЭО. Применение ЯЭО для установления структуры веществ. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.
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.
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).
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.
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 $^{13}\text{C}$ 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.
<b>3. Практические</b>		

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

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	

1	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	4	-	8	8	16
2	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	6	-	12	12	28
3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	4	-	8	14	18
4	Основные принципы масс-спектрометрии	4	-	8	4	16
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	6	-	12	12	28
6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	6	-	12	12	22
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	4	-	8	16	16
	Итого:	34	-	68	78	180

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

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- решение задач;

#### 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	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков / Ю.М. Воловенко, [и др.] .— М. : ICSPF PRESS, 2011 .— 694 с.
2	<a href="#">Лебедев А.Т.</a> Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды / А.Т. Лебедев. - М.: <a href="#">Техносфера</a> , 2013. – 632 с. – URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=235731&amp;sr=1">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=235731&amp;sr=1</a>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Преч Э. Определение строения органических соединений / Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Афвольтер ; пер. с англ. Б.Н. Тарасевича .— М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006 .— 439 с.
4	<a href="#">Лебедев А.Т.</a> Масс-спектрометрия в органической химии : Учебное пособие для студ. вузов, обуч. по специальности 011004- Органическая химия / А. Т. Лебедев .— М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003 .— 493 с.
5	Основы масс-спектрометрии органических соединений / В. Г. Заикин, А. В. Варламов, А. И. Микая, Н. С. Простаков; Рос. акад. наук. Ин-т нефтехим. синтеза им. А. В. Топчиева .— М. : Наука, 2001 .— 285 с.
6	Казицына Л. А. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектропии в органической химии : учеб. пособие для студентов хим. специальностей ун-тов / Л. А. Казицына, Н. Б. Куплетская. — М. : Изд-во МГУ, 1979. — 236 с.

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

№ п/п	Источник
7	American Chemical Society ACS Publications - полнотекстовая база данных научных журналов, <a href="http://pubs.acs.org">http://pubs.acs.org</a>
8	Электронно-библиотечная система "Университетская библиотека online" URL: <a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a>
9	Royal Society of Chemistry The Royal Society of Chemistry (RSC) - полнотекстовая база данных научных журналов, <a href="http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp">http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp</a>

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

№ п/п	Источник
1	Современные методы синтеза гетероциклических соединений : учебно-методическое пособие для вузов / сост. : Х.С. Шихалиев, М.Ю. Крысин, Н.В. Столповская, А.В. Зорина .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр Научная книга, 2012 .— 21 с.

**17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)**

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

Компьютер и мультимедийные установки, ГХ-масс-спектрометры, ВЭЖХ-масс-спектрометры.

**19. Фонд оценочных средств:**

**19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения**

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС (средства оценивания)
ОПК-1 Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Знать: основные параметры спектров ЯМР $^1\text{H}$ , классификацию спиновых систем, способы упрощения сложных спектров	Параметры спектров ЯМР $^1\text{H}$ , классификация спиновых систем, способы упрощения сложных спектров	Устный опрос
	Уметь: анализировать закономерности масс-спектрометрического распада молекулярных ионов	закономерности масс-спектрометрического распада молекулярных ионов различных классов органических соединений	Устный опрос
	Владеть: проведением комплексного исследования органических веществ с применением физико-химических методов	Анализ спектральных данных при комплексном исследовании органических веществ с применением физико-химических методов	Устный опрос

ОПК-2 Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Знать: основные требования к образцам для спектральных исследований;	Требования к образцам для ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии	Устный опрос
	Уметь: проводить подготовку образцов для спектральных исследований	Подготовка образцов для ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии	Устный опрос
	Владеть: методиками обработки спектральных данных	Особенности проведения анализа органических соединений методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии	Устный опрос
ОПК-5 Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений	Знать: основные взаимосвязи структуры органических соединений и спектральных данных	взаимосвязь структуры органических соединений и спектральных данных	
	Уметь: Проводить поиск, обработку и анализ спектральных данных различных классов органических соединений	Поиск, обработка и анализ спектральных данных различных классов органических соединений	
	Владеть: навыками описания спектров и формулировки предложений о структуре органических соединений	Навыки описания спектров и формулировка предложений о структуре органических соединений	
ПК-3 Владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания	Знать: основные принципы устройства спектрометров.	Устройство ЯМР- и масс-спектрометров	Устный опрос
	Уметь: выбирать режимы регистрации спектров	Режимы регистрации ЯМР- и масс-спектров	Устный опрос
	Владеть: методиками обработки спектральных данных	Методики обработки ЯМР- и масс-спектров	Устный опрос
<b>Промежуточная аттестация</b>			<b>КИМ</b>

## 19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

- 1) знание основных принципов ЯМР-спектроскопии;
- 2) знание основных принципов масс-спектроскопии;
- 3) знание методов подготовки образцов и регистрации ЯМР- и масс-спектров;
- 4) знание основных принципов расшифровки ЯМР- и масс-спектров;
- 5) владение способностью иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

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

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформирован	Шкала оценок
---------------------------------	---------------------	--------------

	ности компетенций	
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

### **19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

#### **19.3.1 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  $^1\text{H}$  спектроскопия отдельных классов органических соединений. Функциональные производные углеводородов.
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).

#### **19.3.2 Перечень практических заданий**

#### **19.3.3 Тестовые задания**

#### **19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ**



### **19.3.5 Темы курсовых работ**

### **19.3.6 Темы рефератов**

## **19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

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

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме устного опроса, решения задач, тестирования. Критерии оценивания приведены выше.

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.

При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.