

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
органической химии



Шихалиев Х.С.
26.05.2025г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**Б1.В.07 ЯМР и хромато-масс-спектрометрические методы
исследования в органической химии**

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.05.01
Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** Фундаментальная химия в профессиональном образовании
- 3. Квалификация выпускника:** химик, преподаватель химии
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра органической химии
- 6. Составители программы:** Крысин Михаил Юрьевич, д.х.н., доц., Новичихина Надежда Павловна, к.х.н., доц.
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета, протокол № 10-03 от 27.03.2025 г
- 8. Учебный год:** 2029-2030 **Семестр(ы)/Триместр(ы):** 9

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Цель освоения учебной дисциплины: Формирование у обучающихся углубленных профессиональных знаний в области спектральных методов исследования органических веществ для проведения инструментального анализа при решении производственных и исследовательских задач.

Задачи учебной дисциплины:

- изучение современного состояния методов анализа органических веществ;
- получение профессиональных знаний об основах ЯМР и хромато-масс-спектрометрических методах анализа, позволяющих решать производственные, технологические и научные задачи;
- установление структуры и свойств органических соединений по спектральным данным.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Часть, формируемая участниками образовательных отношений, блока Б1.

Для изучения курса необходимы знания, полученные при прохождении дисциплин «Математика», «Физика», «Органическая 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-2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области аналитической, физической, неорганической, органической и полимерной химии	ПК -2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	знать: - основные классы органических веществ; уметь: - описывать структуру органических соединений, устанавливать связь между строением и спектральными характеристиками органических соединений; - анализировать и применять связи между строением, спектральными характеристиками и физическими свойствами органических веществ; владеть: - навыками использования справочной и монографической литературы, электронных научно-образовательных ресурсов для самостоятельной работы по освоению специальных разделов химии.
		ПК -2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	знать: - спектральные особенности органических соединений; уметь: - определять возможность и направление протекания химических процессов исходя из представлений об их термодинамических и кинетических характеристиках владеть: - навыками использования базового химического и физико-математического аппарата знаний для освоения специальных разделов химии

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации зачет с оценкой

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
			9 семестр
Аудиторные занятия		76	76
в том числе:	лекции	32	32
	практические		
	лабораторные	44	44
Самостоятельная работа		32	32
Форма промежуточной аттестации (зачет с оценкой – 36 час.)		36	36
Итого:		144	144

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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 ^1H . Константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Взаимосвязь КССВ и структуры органических соединений. ЯМР ^1H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Спектроскопия ЯМР ^{13}C .	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
1.3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	Гомо- и гетероядерные ЯЭО. Применение ЯЭО для установления структуры веществ. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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).	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893

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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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}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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
2. Лабораторные занятия			
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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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 ^1H . Константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Взаимосвязь КССВ и структуры органических соединений. ЯМР ^1H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Спектроскопия ЯМР ^{13}C .	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
2.3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	Гомо- и гетероядерные ЯЭО. Применение ЯЭО для установления структуры веществ. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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).	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893
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	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893

		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}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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)					
		Лекции	Контроль	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	4	0		4	6	14
2	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	6	0		8	6	20
3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	4	0		4	2	10
4	Основные принципы масс-спектрометрии	4	0		6	6	16
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	4	0		8	2	14
6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	6	0		8	6	20
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	4		0	6	4	14
8	Зачет с оценкой		36				36
	Итого:	32	36		44	32	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

В учебном процессе используются следующие формы работы:
 - проведение лекций,

- проведение лабораторных работ,
- внеаудиторная самостоятельная работа студентов.

Организационная структура лекционного занятия:

1. Формулировка темы, целей занятия, постановка проблемного вопроса.
2. Разъяснение вопросов теоретического и практического плана для решения поставленной проблемы.
3. Рассмотрение путей решения проблемного вопроса на конкретных примерах.
4. Заключение, формулировка выводов.
5. Формулировка задания для самостоятельной домашней работы. Озвучивание темы следующего занятия.

Организационная структура лабораторного занятия:

1. Формулировка целей занятия и ответы на вопросы студентов.
2. Ознакомление с теоретической основой работы, основными методами исследования.
3. Решение экспериментальных задач.
4. Анализ результатов и предоставление их для предварительной проверки преподавателю.

На лабораторных занятиях студенты индивидуально либо в составе малой группы выполняют задание согласно плану. В ходе занятий студенты приобретают навыки использования современных и классических методов исследования строения и состава органических соединений. Учатся проводить расшифровку и анализ экспериментальных данных, полученных при помощи спектральных методов исследования, интерпретировать результаты.

Выполнение и защита 70% заданий является обязательным условием текущей аттестации.

Самостоятельная работа предполагает, как регулярную подготовку студентов к различным формам занятий, так и выполнение отдельных заданий в процессе изучения теоретических положений в ходе проведения занятий. Внеаудиторная самостоятельная работа включает проработку конспектов предыдущих лекций, выполнение заданий в рамках подготовки к практическим занятиям, конспектирование материала по темам, выносимым на самостоятельное изучение.

Текущая аттестация обеспечивает проверку освоения учебного материала, приобретения знаний, умений и навыков в процессе аудиторной и самостоятельной работы студентов. Она включает регулярную работу на лабораторных занятиях. При подготовке к текущей аттестации студенты изучают рекомендованную преподавателем литературу. Планирование и организация текущей аттестации осуществляется в соответствии с содержанием рабочей программы и календарно-тематическим планом с применением фонда оценочных средств. Текущая аттестация является обязательной, ее результаты оцениваются в балльной системе и могут быть учтены при промежуточной аттестации обучающихся.

Текущий контроль проводится путем проверки выполнения домашнего задания, входного контроля (в виде тестовых или индивидуальных заданий).

Контроль освоения теоретического материала проводится после прослушивания студентами лекционного материала по каждой теме в виде устного опроса и выполнения домашних заданий. Выполнение домашних заданий контролирует преподаватель. Ежеженедельно студенты имеют возможность выяснять все вопросы, освоение которых вызывает трудности, на консультациях с лектором в специально отведенные для этого контактные часы. В процессе реализации курса запланировано проведение контрольных работ.

При подготовке к промежуточной аттестации (зачету с оценкой, экзамену) необходимо опираться на рекомендованные литературные источники, материал лекций, практических работ (теоретическая часть), образовательные интернет-ресурсы. Необходимо структурировать весь материал, рекомендуется по каждому вопросу составить краткий опорный конспект, составить словарь ключевых терминов. Для повышения эффективности, по мере повторения материала, необходимо проводить анализ взаимосвязи различных разделов дисциплины.

Обучение лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Для лиц с нарушением слуха информация по учебной дисциплине предоставляется на бумажном или электронном носителе, допускается присутствие ассистентов и сурдопереводчиков на занятиях. Промежуточная аттестация для таких студентов проводится в письменной форме с общими критериями оценивания; при необходимости время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации с использованием программ-синтезаторов речи, а также использование звукозаписывающих устройств на лекциях. На занятиях также может присутствовать ассистент. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование. время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Студенты с нарушениями опорно-двигательного аппарата могут проходить часть занятий дистанционно. Промежуточная аттестация для них проводится на общих основаниях, при необходимости процедура экзамена может быть реализована дистанционно.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (Курс «ЯМР и хромато-масс-спектрометрические методы исследования в органической химии», <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Бёккер, Ю. Спектроскопия : руководство / Ю. Бёккер. — Москва : Техносфера, 2009. — 528 с.
2	Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений: пер. с англ. / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. — М.: Бином. Лаборатория знаний, 2011. — 557 с.
3	Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии / А.Т. Лебедев. — М. : Бином. Лаборатория знаний, 2003. — 493 с.

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.
5	Юровская, М. А. Основы органической химии : учебное пособие / М. А. Юровская, А. В. Куркин. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 239 с.
6	Сафиулина, А. Г. Теоретические методы исследования продуктов органического синтеза : учебное пособие / А. Г. Сафиулина, Р. Г. Тагашева - Казань : Издательство КНИТУ, 2018. - 88 с.
7	Филатова. Е. А. Функционализация органических соединений : учебное пособие / Е. А. Филатова. - Ростов н/Д : ЮФУ, 2020. - 167 с.

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

№ п/п	Ресурс
8	www.lib.vsu.ru ЗНБ ВГУ
9	https://biblioclub.ru/ ЭБС «Университетская библиотека online»
10	https://e.lanbook.com/ ЭБС «Лань»
11	https://urait.ru/ ЭБС «Образовательная платформа ЮРАЙТ»
12	https://www.elibrary.ru/ Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU
13	Курс «ЯМР и хромато-масс-спектрометрические методы исследования в органической химии», https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Идентификация органических соединений физическими методами : учебно-методическое пособие / составители: Д. Ю. Вандышев, Ю. А. Ковыгин, А. Ю. Потапов, Х. С. Шихалиев, М. Ю. Крысин. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2020. — 126 с. — Тираж 100. 7,9 п.л. — ISBN 978-5-9273-3267-0.
2	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: https://e.lanbook.com/book/148676

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ, электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации дисциплины используются классические образовательные технологии без замены аудиторных занятий (лекций и лабораторных занятий) на ДОТ. При реализации дисциплины применяются различные типы лекций (вводная, обзорные, тематические, проблемные), лабораторные занятия. Проведение текущих аттестаций осуществляется в форме проверки домашних заданий, тестов, контрольных работ. Проведение промежуточных аттестаций осуществляется в форме устного собеседования по КИМ. Самостоятельная работа по всем разделам предполагает выполнение обязательных письменных домашних заданий. Для самостоятельной работы рекомендуется список литературы. 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» (курс «ЯМР и хромато-масс-спектрометрические методы исследования в органической химии», <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11893>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины также рекомендуются ресурсы для электронного обучения (п. 15).

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

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-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Домашние задания Тестовые задания Устный опрос
2.	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Устный опрос; контрольная работа
3.	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Домашние задания Тестовые задания Устный опрос
4.	Основные принципы масс-спектрометрии	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Домашние задания Тестовые задания Устный опрос
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Домашние задания Тестовые задания Устный опрос

6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Домашние задания Тестовые задания Устный опрос
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	ПК-2	ПК-2.1, ПК-2.2	Домашние задания Тестовые задания Устный опрос
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Перечень вопросов

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

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Она включает в себя несколько форм контроля: практикоориентированные задания/домашние задания, Контрольная работа, Тесты, Лабораторные работы, направленные на комплексную оценку знаний и навыков студентов.

Аттестация включает устный опрос, который может проводиться как в форме индивидуального опроса, так и фронтальной беседы. Письменные работы представлены контрольными работами и тестами. Контрольные работы позволяют проверить знания и умение студентов применять теоретические концепции на практике. Тестирование используется для быстрой оценки уровня знаний по определенным темам.

Контрольные работы и тесты могут проводиться как в электронной форме, так и на занятиях. Время выполнения этих задач устанавливается преподавателем. Результаты текущей аттестации могут быть учтены при проведении промежуточной аттестации.

Технология проведения текущей аттестации включает использование электронных ресурсов для организации процесса контроля, что позволяет автоматизировать оценку и хранение результатов. Мониторинг успеваемости осуществляется через электронный журнал оценок, что позволяет преподавателям и студентам отслеживать прогресс в режиме реального времени.

Вопросы для домашнего задания формулирует преподаватель на лабораторном занятии. На следующем лабораторном занятии студенты представляют решение домашнего задания, занятие начинается с обсуждения вариантов решения.

Контрольные работы проводятся на лабораторном занятии, о чем преподаватель заранее сообщает обучающимся. Темы, по которым проводятся контрольные работы, и темы коллоквиумов представлены в соответствующих методических указаниях, рекомендованных студентам.

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 и практическое задание, позволяющее оценить степень сформированности умений и навыков.

При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены в п. 20.2.

20.1. Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: практико-ориентированные задания, домашние задания, лабораторные работы, тестовые задания, контрольные работы, устный опрос.

Описание технологии проведения лабораторной работы.

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

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

Перечень лабораторных работ:

1. «Практические основы пробоподготовки и регистрации ЯМР спектров»
2. «Определение наличия функциональных групп в структуре органических соединений по ЯМР спектрам»
3. «Определение структуры органических веществ по данным ЯМР спектроскопии. Решение задач»
4. «Расчет химических сдвигов по инкрементам. Расшифровка ЯМР ^1H спектров первого порядка.»
5. «Расшифровка спектров ЯМР ^1H высшего порядка.»
6. «Использование компьютерных программ, моделирующих ЯМР спектры»
7. «Установление брутто-формулы соединения, исходя из интенсивностей изотопных пиков молекулярного иона»
8. «Установление по масс-спектру структурной формулы соединения. Фрагментация органических соединений»
9. «Анализ и мониторинг состава смесей органических соединений методом хромато-масс-спектрометрии»

Вопросы для домашнего задания формулирует преподаватель на занятии. На следующем занятии студенты представляют решение домашнего задания, занятие начинается с обсуждения вариантов решения.

Устный опрос проводится на лабораторном занятии, о чем преподаватель заранее сообщает обучающимся. Темы, по которым проводятся устный опрос, и программа к ним представлена в соответствующих учебно-методических пособиях, рекомендованных студентам (приведены в п.15, 16). По согласованию с обучающимися устный опрос может проводиться в форме тестирования по основным разделам курса.

Перечень заданий для контрольных работ (пример)

I. 2-Аминопиридин подвергли реакции электрофильного моноиодирования. Продукт реакции идентифицировали методом ЯМР- спектроскопии. На основе представленных ниже спектральных данных, предложите структуру продукта реакции.

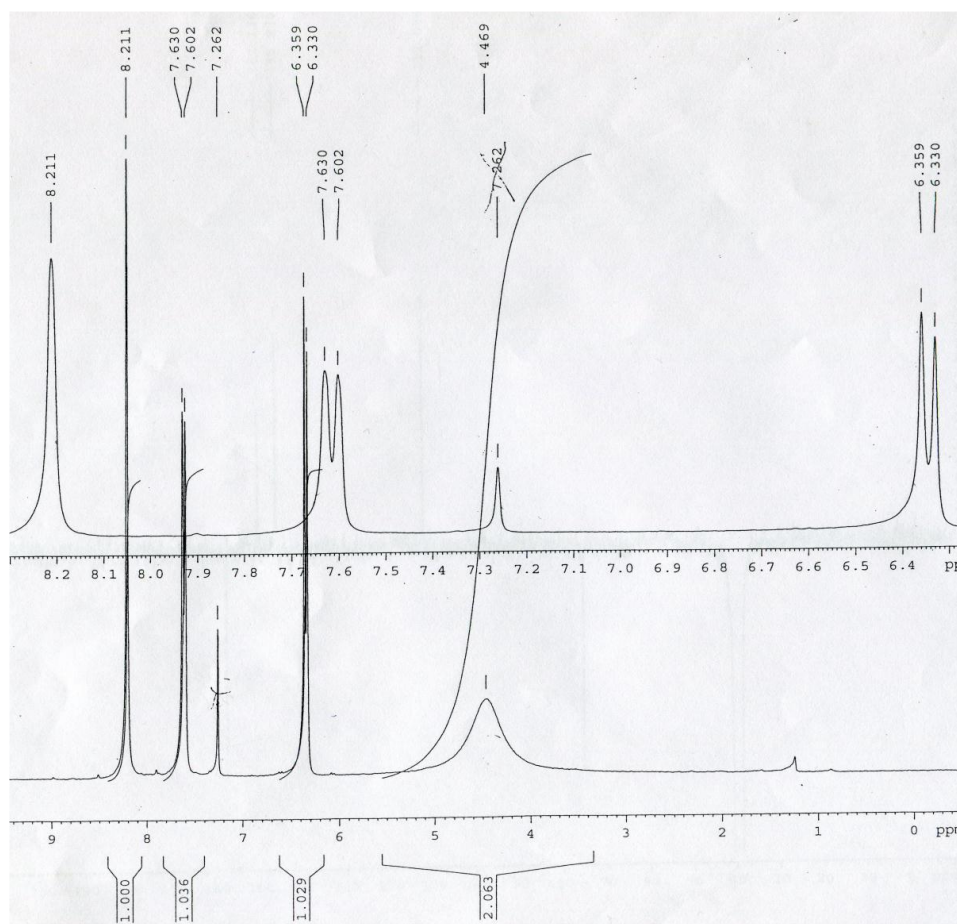


Рис.1. Спектр ЯМР ^1H продукта реакции, растворитель CDCl_3 , 300 МГц

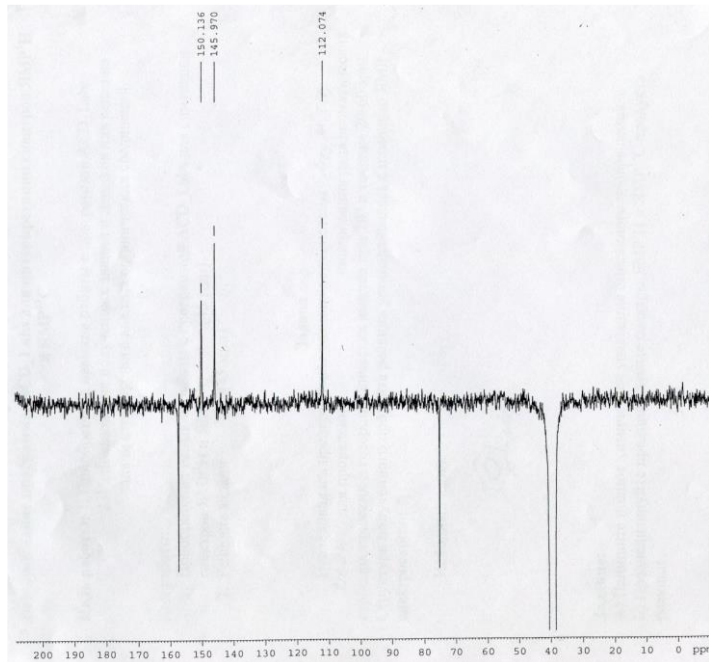
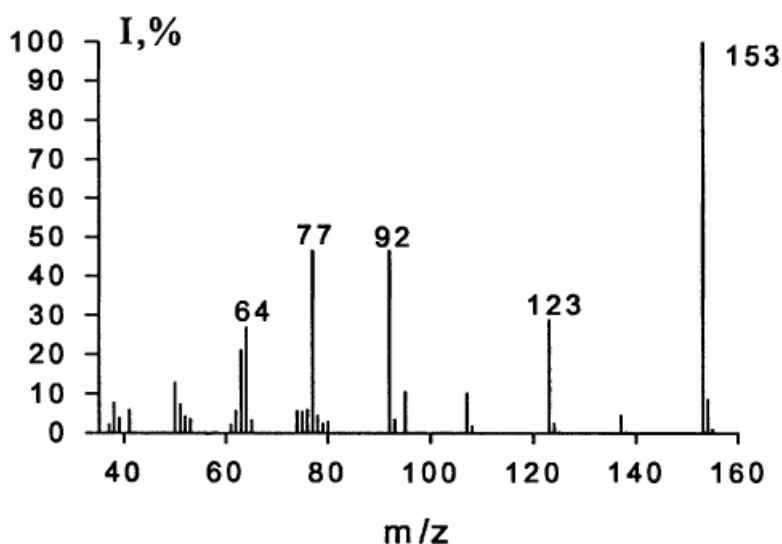


Рис. 2. Спектр ЯМР ^{13}C продукта реакции, растворитель DMSO-d_6 , 300 МГц; использована методика позволяющая идентифицировать узловые атомы углерода (сигналы «повернуты» вниз)

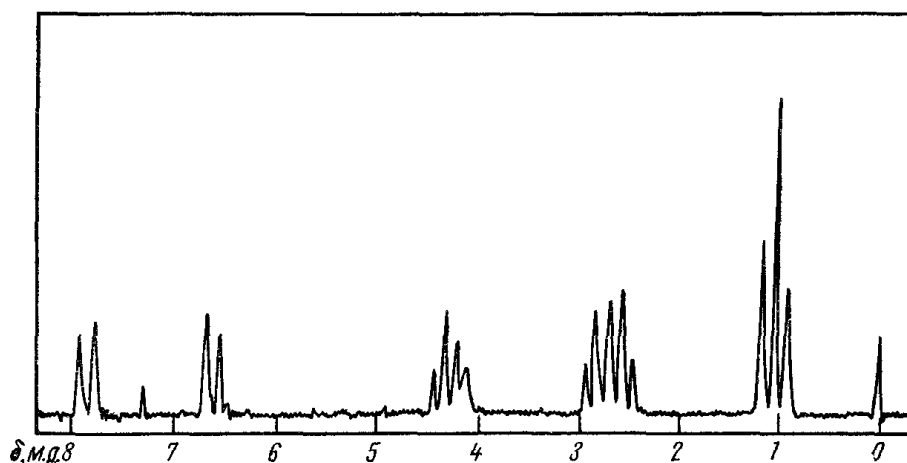
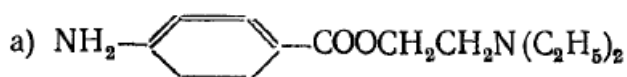
II. Идентифицируйте соединение по спектру электронного удара .



m/z	I, %	m/z	I, %
37	2,09	77	46,5
38	7,59	78	4,39
39	3,79	79	2,39
41	5,79	80	2,79
50	12,6	92	46,5
51	7,29	93	3,39
52	4,19	95	10,3
53	3,50	96	0,66
61	2,09	107	10,0
62	5,50	108	0,78
63	21,0	123	28,6
64	26,7	124	2,32
65	3,19	137	4,39
74	5,50	153	100
75	5,39	154	8,24
76	5,89	155	0,91

Перечень практико-ориентированных заданий (пример)

1. Сопоставьте спектр ПМР со структурой соединений



2. Предположите пути фрагментации, приводящие к образованию ионов в масс-спектрах

а) бензилметилкетона: m/e 134, 119, 92, 91, 65, 51, 43;

б) метилизопропилкарбинола: m/e 73, 55, 45, 43.

Перечень тестовых заданий (пример)

1. ЯМР расшифровывается как

- а) ядерный магнитный резонанс;
- б) ядерный молекулярный резонанс;
- в) ядерный магнитный ренесанс.

2. Химический сдвиг - это:

- а) сдвиг атома под действием химии;
- б) смещение частоты проявления ядра под действием химического окружения;
- в) медицинский термин.

3. Количественная характеристика спин-спинового взаимодействия:

- а) дельта;
- б) переменная;
- в) константа.

4. Мультиплетность сигнала метильной группы в составе этильного заместителя:

- а) синглет;
- б) дублет;
- в) триплет;

5. Мультиплетность сигналов протонов в составе фрагмента –O–CH(Cl)–CH₂–NO₂:

- а) триплет, триплет
- б) триплет, дублет
- с) синглет, синглет
- И т.д.

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

20.2. Промежуточная аттестация

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

Перечень вопросов к дифференцированному зачету:

№	Содержание вопросов
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.	Химический сдвиг. 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 H. Константы спин-спинового взаимодействия (KCCB).

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 ^1H 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}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 ^1H 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.	Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.
17.	Масс-спектры основных классов органических соединений (гидроксилсодержащие соединения).
18.	Масс-спектры основных классов органических соединений (углеводороды).
19.	Применение ЯЭО для установления структуры веществ.
20.	Масс-спектры основных классов органических соединений (оксосоединения).

Пример КИМ к дифференцированному зачету:

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой органической химии

_____ Х.С.Шихалиев
_____.____. 20__г.

Направление подготовки/специальность: 040501, Фундаментальная и прикладная химия
Дисциплина: ЯМР и хромато-масс-спектрометрические методы исследования в органической химии
Вид контроля: дифференцированный зачет

Контрольно-измерительный материал № 1

1. Химический сдвиг. Факторы, определяющие химический сдвиг.
2. Газовая хроматография/масс-спектрометрия.

Преподаватель: _____ / Новичихина Н.П.

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету с оценкой

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

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене.

20.3 Задания, рекомендованные к использованию при проведении диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения данной дисциплины

Не предусмотрены.

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЙ*

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Направление/специальность _____
код и наименование направления/специальности

Дисциплина _____
код и наименование дисциплины

Профиль подготовки/специализация _____
в соответствии с Учебным планом

Форма обучения _____

Учебный год _____

Ответственный исполнитель

_____ .__ 20__
должность, подразделение подпись расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО

Куратор ООП

по направлению/специальности _____ .__ 20__
подпись расшифровка подписи

Начальник отдела обслуживания ЗНБ _____ .__ 20__
подпись расшифровка подписи

Программа рекомендована НМС _____
наименование факультета, структурного подразделения
 протокол № _____ от _____.20__ г.

ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ†

РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Направление/специальность _____
код и наименование направления/специальности

Дисциплина _____
код и наименование дисциплины

Профиль подготовки/специализация _____
в соответствии с Учебным планом

Форма обучения _____

Учебный год _____

В связи (на основании) _____
изложить п. ____ РПД в следующей редакции:

=====

Ответственный исполнитель

должность, подразделение

подпись

расшифровка подписи

____.____.20__

СОГЛАСОВАНО

Куратор ООП

по направлению/специальности

подпись

расшифровка подписи

____.____.20__

Начальник отдела обслуживания ЗНБ

подпись

расшифровка подписи

____.____.20__

=====

Изменения РПД рекомендованы НМС _____

наименование факультета, структурного подразделения

протокол № _____ от _____.20__ г.

† При наличии **РАЗМЕЩАЕТСЯ** на образовательном портале «Электронный университет ВГУ»