

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
31.03.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.05.01 Спектральные методы установления структуры
органических соединений

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления:

04.03.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация:

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, 27.03.2025, протокол №10-03
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2028-2029

Семестр(ы): 8

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. Дисциплина по выбору

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 проводить сбор, анализ и обработку научно-технической (научной) информации, необходимой для решения задач химической направленности, и, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК -1.1	Обеспечивает сбор научно-технической (научной) информации, необходимой для решения задач исследования, поставленных специалистом более высокой квалификации	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - стандартные методы выделения, получения, идентификации и исследования свойств биологически активных веществ; - источники научно-технической информации, журналы отечественной и международной научной периодики, основы поиска патентной информации; <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - осуществлять поиск научно-технической информации с использованием ресурсов сети Интернет, баз данных; <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - приемами поиска научно-технической информации
		ПК -1.2	Составляет аналитический обзор литературных источников по заданной тематике, оформляет отчеты о выполненных научно-исследовательских работах по заданной форме	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методы планирования эксперимента. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - оформлять отчет о результатах поиска информации; <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методами составления отчетов о результатах поиска; навыками планирования, анализа и обобщения результатов.
ПК -4	Способен выбирать технические средства и методы испытаний объектов неорганической и органической химии для решения технологических	ПК -4.1	Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана технологической деятельности	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методы спектрального анализа органических веществ; <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - проводить интерпретировать спектральные данные; <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - техникой проведения лабораторных работ;
		ПК -4.2	Готовит элементы документации, проекты планов и	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные направления применения спектральных методов анализа;

			программ отдельных этапов выполнения технологической задачи	Уметь: - обрабатывать результаты эксперимента; Владеть: - навыками подготовки отчетной документации, проектов планов по результатам спектрального анализа органических веществ
	ПК -4.3	Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных технологических задач		Знать: - основные методы ЯМР-спектроскопии Уметь: - анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы. Владеть: - базовыми приемами работы со стандартным и специализированным лабораторным оборудованием для спектрального анализа органических веществ;
	ПК -4.4	Готовит объекты исследования		Знать: - методы и приемы подготовки органических веществ к исследованиям Уметь: - планировать комплекс методов для выделения данных интересующего компонента из смеси органических соединений, Владеть: - техникой воспроизведения стандартных методик спектрального анализа органических веществ.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 3/108.

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость	
	Всего	По семестрам
Аудиторные занятия	72	72
в том числе:	лекции	36
	практические	36
	лабораторные	
Самостоятельная работа	36	36
Форма промежуточной аттестации (зачет с оценкой)		
Итого:	108	108

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=17552
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 непрямое 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=17552
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=17552
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=17552
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=17552
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=17552
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	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17552

		простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в масс-спектрах. Библиотеки масс-спектров.	
2. Практические 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=17552
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 непрямое 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=17552
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=17552
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=17552
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=17552
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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17552
2.7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления	Молекулярный ион и изотопные пики в спектрах низкого и высокого разрешения. Молекулярная формула. Индекс водородной насыщенности. Азотное правило.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=17552

	структуры веществ	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.	
--	-------------------	---	--

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Основные принципы ядерного магнитного резонанса	4	4		12	20
2	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	6	8		4	18
3	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	4	8		4	16
4	Основные принципы масс-спектрометрии	4	4		4	12
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	6	4		4	14
6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	6	4		4	14
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	2	4		4	10
Итого:		36	36		36	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

В учебном процессе используются следующие формы работы:

- проведение лекций,
- проведение практических занятий,
- 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.

Целью практических занятий является систематизация и обобщение знаний по изучаемой теме или разделу, формирование навыков работы с источниками научно-технической информации, журналами отечественной и международной научной периодики, овладение основами поиска патентной информации, развитие умений сопоставлять и сравнивать разные точки зрения. Подготовка к практическому занятию предполагает самостоятельную проработку учебной и научно-технической литературы по соответствующим вопросам.

Организационная структура практического занятия:

1. Формулировка целей занятия и ответы на вопросы студентов.
2. Ознакомление с теоретической основой работы.
3. Обсуждение вопросов работы.
4. Ответы на вопросы преподавателя и студентов.

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.

Также запланирована подготовка студентами рефератов по заданным темам.

Текущая аттестация обеспечивает проверку освоения учебного материала, приобретения знаний, умений и навыков в процессе аудиторной и самостоятельной работы студентов. Она включает регулярную работу на практических 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 бальной системе и могут быть учтены при промежуточной аттестации обучающихся.

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

Контроль освоения теоретического материала проводится после прослушивания студентами лекционного материала по каждой теме в виде реферата или контрольной работы. Еженедельно студенты имеют возможность выяснить 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 и коллоквиумов.

При подготовке к промежуточной аттестации (зачету) 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 психо-физических 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 представление

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.

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 : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785990613461.html
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: https://e.lanbook.com/book/73013
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: https://e.lanbook.com/book/110953

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 : https://www.studentlibrary.ru/book/ghtu_010.html
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: https://e.lanbook.com/book/135515
6	Сафиуллина, А. Г. Теоретические методы исследования продуктов органического синтеза : учебное пособие / А. Г. Сафиуллина, Р. Г. Тагашева - Казань : Издательство КНИТУ, 2018. - 88 с. - ISBN 978-5-7882-2406-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788224060.html
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 : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927534982.html

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

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

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачники, 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: 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, практических и лабораторных занятий) на ДОТ. При реализации дисциплины применяются различные типы лекций (вводная, обзорные, тематические, проблемные), практические занятия. Проведение текущих аттестаций осуществляется в форме проверки домашних заданий, тестов, контрольных работ, коллоквиумов. 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 практических занятий 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/course/view.php?id=17552>), 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 НТР-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-1.1 ПК-1.2	Устный опрос
2.	Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие	ПК-1 ПК-4	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 ПК-4.4	Устный опрос; контрольная работа

3.	Ядерный эффект Оверхаузера и корреляционная спектроскопия ЯМР	ПК-1 ПК-	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 ПК-4.4	Устный опрос
4.	Основные принципы масс-спектрометрии	ПК-1 ПК-	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 ПК-4.4	Устный опрос;
5	Физико-химические основы закономерностей масс-спектрометрического распада и направлений фрагментации соединений важнейших классов органических соединений	ПК-4	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 ПК-4.4	Устный опрос
6	Хромато-масс-спектрометрические методы качественного и количественного анализа органических соединений	ПК-4	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 ПК-4.4	Устный опрос;
7	Практические основы интерпретации масс-спектров и установления структуры веществ	ПК-4	ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 ПК-4.4	Устный опрос, контрольная работа
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет				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: практико-ориентированные задания/домашние задания, Контрольная работа, Тесты, Рефераты, Коллоквиумы, 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 практическом занятии. На следующем практическом занятии студенты представляют решение домашнего задания, занятие начинается с обсуждения вариантов решения.

Контрольные работы и коллоквиумы проводятся на практическом занятии, о чём преподаватель заранее сообщает обучающимся. Темы, по которым проводятся контрольные работы, и темы коллоквиумов представлены в соответствующих методических указаниях, рекомендованных студентам. По согласованию с обучающимися обсуждение рефератов проводиться в форме устной беседы.

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:

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 спектрометрии. Решение задач»

«Расчет химических сдвигов по инкрементам. Расшифровка ЯМР ^1H спектров первого порядка.»

«Расшифровка спектров ЯМР ^1H 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 малосущественные ошибки, которые студент обнаруживает и быстро исправляет самостоятельно или при помощи преподавателя), что соответствует освоению компетенций.	Повышенный уровень Базовый уровень Пороговый уровень	Зачтено

<p>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.</p>	<p>–</p>	<p>Не зачтено</p>
---	----------	-------------------

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о проведении промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования Воронежского государственного университета.

Промежуточная аттестация студентов является основной формой контроля аудиторной работы студентов и проводится с целью установления уровня и качества подготовки студентов и определяет:

- полноту и прочность теоретических знаний;
- сформированность умений применять теоретические знания при решении практических и профессиональных задач;
- сформированность общих и профессиональных компетенций.

Подготовка к промежуточной аттестации является формой самостоятельной работы студентов. При этом обучающийся должен использовать рекомендованный рабочей программой перечень основной и дополнительной литературы, материалы лекций, информационные и электронно-образовательные ресурсы. Для подготовки к промежуточной аттестации студент также может использовать перечень вопросов.

Промежуточная аттестация проводится в устной или письменной форме. Преподаватель, ответственный за её проведение, вправе задавать студентам дополнительные вопросы по любым разделам учебной дисциплины; все вопросы и ответы фиксируются в листе ответов студента. Время зачета с оценкой регламентируется действующими нормативными документами. Результат промежуточной аттестации заносится преподавателем в лист ответов обучающегося (после чего студент расписывается, подтверждая своё согласие с выставленной оценкой), а также в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Собеседование по билетам к зачету

Перечень вопросов к зачету:

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 непрямое спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР ^1H . 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 ^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 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 (оксокоединения).

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

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

Во время зачета 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.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

При оценивании результатов обучения на зачете 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** используется 2-балльная шкала:

«зачтено», «не зачтено». Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
<i>Полное соответствие ответа обучающегося всем перечисленным критериям. Продемонстрировано знание основных классов органических соединений, их строения, способов получения, физических и химических свойств, умение определить реакционные центры в молекуле, объяснить механизм основных реакций, владение техникой лабораторных работ в органической лаборатории. Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом органической химии, способен иллюстрировать ответ примерами, уравнениями реакций, экспериментальными данными. Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному (двум) из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Недостаточно продемонстрировано знание основных классов органических соединений, их строения, способов получения, физических и химических свойств. Ответ на контрольно-измерительный материал не</i>	<i>Повышенный уровень Базовый уровень Пороговый уровень</i>	<i>Зачтено</i>

<p>соответствует любым двум (трем) из перечисленных показателей, обучающийся дает неполные ответы на дополнительные вопросы. Демонстрирует частичные знания основных классов органических соединений, их строения, способов получения, физических и химических свойств, не умеет определить реакционные центры в молекуле, объяснить механизм основных реакций, или имеет не полное представление о лабораторных работах в органической химии, допускает существенные ошибки при написании уравнений органических реакций.</p> <p>Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем(четырем) из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания основных классов органических соединений, их строения, способов получения, физических и химических свойств, допускает грубые ошибки при написании формул органических соединений и уравнений органических реакций.</p>		
<p>–</p>		Не зачтено

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

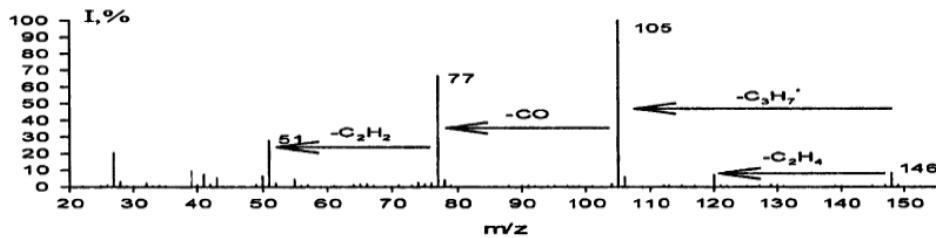
5. Мультиплетность сигнала метильной группы в составе этильного заместителя:

- синглет
- дублет
- триплет

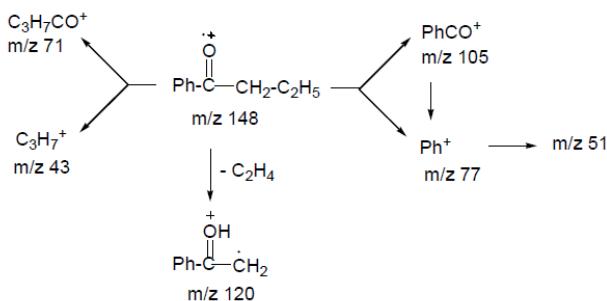
6. Мультиплетность сигналов протонов в составе фрагмента $-\text{O}-\text{CH}(\text{Cl})-\text{CH}_2-\text{NO}_2$:

- 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
Зачтено	При решении заданий контрольной работы продемонстрировано знание теоретических основ дисциплины, умение применять теоретические знания для решения практических задач.
Не зачтено	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 ^1H МУЛЬТИПЛЕТНОСТЬ СИГНАЛОВ ПРОТОНОВ МЕТИЛЕНОВЫХ ГРУПП В СТРУКТУРЕ X-CH₂-CH₂-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 С-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 _____

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

Не предусмотрены