

ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 29 от «24» июня 2019 г.

Согласовано:
Председатель УМК факультета /института



/ Гарифуллина Г.Г.

Зав. кафедрой /
Майстренко В.Н.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина Физические методы исследования

Обязательная часть

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность)

04.03.01-Химия

Направленность (профиль) подготовки
Органическая и биоорганическая химия

Квалификация
Бакалавр

Разработчик (составитель) доцент, к.х.н., доцент (должность, ученая степень, ученое звание)	 _____ Фамилия И.О.) / Ширяева Р.Н.(подпись,
---	--

Для приема: 2019

Уфа 2019 г.

Составитель / составители: к.х.н., доцент Ширяева Р.Н.

Рабочая программа дисциплины *утверждена* на заседании кафедры протокол от « 24 » июня 2019 г. № 29

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'В.Н. Майстренко', is written over a faint grid background.

Заведующий кафедрой _____ / Майстренко В.Н.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)
4. Фонд оценочных средств по дисциплине
 - 4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.
 - 4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины
 - 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины
 - 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Общепрофессиональные навыки	ОПК-2. Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их аст	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ
		ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов
		ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ
Физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	ОПК-4.Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и	ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности ОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик ОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических	Знать: основные теоретические положения смежных с химией естественнонаучных дисциплин Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин Владеть: навыками работы с

	физических задач	наблюдений с использованием физических законов и представлений	учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин
--	------------------	--	--

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физические методы исследования» относится к обязательной части .
Дисциплина изучается на 4 курсе в 7 семестре.

Цели изучения дисциплины : ознакомление студентов с принципиальными основами, практическими возможностями и ограничениями важнейших для химиков физических методов исследования ,знакомство с их аппаратным оснащением и условиями проведения эксперимента.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: при освоении данной дисциплины требуются самые высокие знания, умения и навыки, приобретённые в результате освоения всех предшествующих дисциплин, особенно таких, как органическая химия, физическая химия, строение вещества, физика, аналитическая химия, иностранный язык.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотношенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине.

Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции **ОПК-2** Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
ОПК-2.1. Работает с химическими	Знать: стандартные методы получения, идентификации и	Затрудняется в определении базовых	Имеет четкое, целостное представление о содержании основных химических курсов и общих закономерностях химических

веществами с соблюдением норм техники безопасности	исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	понятий и формулировке основных законов химии	процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин
ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Не умеет	Умеет прогнозировать результаты несложных последовательностей химических реакций с учетом общих закономерностей процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин
	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Не умеет	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии; одно- и двухстадийный синтез по предлагаемой методике с выходом целевого продукта согласно заявленному в методике; проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента в соответствии с заявленными требованиями
	Владеть: базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Не владеет	Владеет навыками синтеза, идентификации и изучения свойств веществ и материалов, правильного протоколирования опытов
ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Затрудняется в выборе метода получения, идентификации и исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ	Знает стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Не умеет	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии; одно- и двухстадийный синтез по предлагаемой методике с выходом целевого продукта согласно заявленному в методике; проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента в соответствии с заявленными требованиями

ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Затрудняется в выборе метода получения, идентификации и исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ	Знает стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
--	---	---	--

Код и формулировка компетенции **ОПК-4** Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	Знать: основные теоретические положения смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Затрудняется в определении базовых понятий и формулировке основных законов смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Имеет четкое, целостное представление об общих закономерностях смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в области химии и материаловедения
	Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения	Не может привести примеры использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения	Имеет четкое, целостное представление о способах использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения
	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин	Не умеет	Умеет решать задачи повышенной сложности из базовых курсов естественнонаучных дисциплин
	Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Не владеет	Владеет навыками критического анализа учебной информации, уровень владения терминологией и понятийным аппаратом позволяет формулировать выводы и участвовать в дискуссии по учебным вопросам базовых математических и естественнонаучных дисциплин
ОПК-4.2.	Знать: математический	Не может привести	Имеет четкое, целостное

Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения	примеры использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения	представление о способах использования математического аппарата при решении задач в области химии и материаловедения
ОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Не умеет Не владеет	Умеет решать задачи повышенной сложности из базовых курсов естественнонаучных дисциплин Владеет навыками критического анализа учебной информации, уровень владения терминологией и понятийным аппаратом позволяет формулировать выводы и участвовать в дискуссии по учебным вопросам базовых математических и естественнонаучных дисциплин

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и	Контрольная работа

	материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Коллоквиум Тест
ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	Знать: основные теоретические положения смежных с химией естественнонаучных дисциплин Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	Знать: математический аппарат, необходимый для решения профессиональных задач в области химии и материаловедения	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным разделам математики и естественнонаучных дисциплин Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	Контрольная работа Коллоквиум Тест

Шкалы оценивания:

для зачета:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

РЕЙТИНГ-ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫФизические методы исследования

Специальность 04.03.01 «Химия»

курс IV, семестр 7

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			минимальный	максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа	1	5	0	5
2. Тестовый контроль	10	1	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	25	1	0	25
Контрольная работа по ЯМР	5	1	0	5
Контрольная работа по масс-спектрометрии	5	1	0	5
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа	1	5	0	5
2. Тестовый контроль	10	1	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	25	1	0	25
Контрольная работа по ИК-спектроскопии	5	1	0	5
Контрольная работа по УФ-спектроскопии	5	1	0	5
Поощрительные баллы				
1. Студенческая олимпиада				
2. Публикация статей				
3. Работа со школьниками (кружок, конкурсы, олимпиады)				
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий	-0,7	8	0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)	-0,2	44	0	-10

Планы лабораторных занятий

Вопросы для лабораторных занятий

Занятие № 1

1. Теоретические основы ЯМР. Основы теории ЯМР-спектроскопии.
2. Магнитные состояния ядер. Эффект Зеемана.

Занятие №2

3. Уравнение резонанса. Продольная и поперечная релаксация. Время и механизмы релаксации.
4. Классификация спиновых систем. Ядерный эффект Оверхаузера.

Занятие №3

5. Спектры ПМР. Химический сдвиг.
6. Спин-спиновое взаимодействие. Константа ССВ.

Занятие №4

7. Химически- и магнитно-эквивалентные протоны. Интегральная интенсивность сигнала.
8. Динамические эффекты в спектрах ЯМР.

Занятие №5.

9. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов.
10. Расшифровка спектров ПМР.

Занятие №6

11. Временное и частотное представление спектра. Принципы импульсной ЯМР-спектроскопии.
12. Факторы, определяющие химические сдвиги.

Занятие №7

13. Ядра ^{13}C . Характеристики ядра.
14. Спин-спиновое взаимодействие.

15. Характерные диапазоны химических сдвигов в методе ^{13}C .

16. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов.

Занятие №8.

17. Константы спин-спинового взаимодействия в ^{13}C .
18. Способы упрощения спектров.

19. Расшифровка спектров ЯМР ^{13}C .

20. Аппаратура в ЯМР спектроскопии.

Занятие № 9

21. Масс-спектрометрия. Ионизация молекул, ее закономерности и методы.
22. Регистрация масс-спектров.

Занятие №10.

23. Пики молекулярных ионов и закономерности их образования.
24. Определение брутто-формулы и фактора неопределенности.

Занятие №11.

25. Фрагментация ионов, ее причины.
26. Основные схемы фрагментации ионов.

Занятие №12.

27. Основные принципы расшифровки масс-спектров.
28. Анализ области пика молекулярного иона.

Занятие №13

29. Принципиальная схема масс-спектрометра.

30. Основные правила образования отрицательных ионов.

4. Занятие №14

31. Квадрупольный масс-анализатор.

32. Время пролетный масс-анализатор.

Занятие №15.

33. Применение масс-спектрометрии в структурном анализе.

34. Масс-спектрометрия неорганических веществ.

Занятие № 16

.

35. Физические основы колебательных переходов в молекулах.

36. Валентные, деформационные колебания. Правило отбора

Занятие №17.

38. Условия характеристичности колебаний. Характеристичность по частоте и интенсивности

39. Влияние ближнего и дальнего взаимодействия на частоту колебаний

Занятие №18

40. Основные принципы расшифровки ИК-спектров.

41. Источники ИК-излучения.

Занятие №19.

42. Диспергирующие устройства и приемники излучения.

43. Техника приготовления образцов.

Занятие №20

44. Обертон. Резонанс Ферми

45. Область «отпечатки пальцев»

Занятие №21

46. Физические основы электронных переходов

47. Хромофоры и ауксохромы. Правило отбора

Занятие №22

48. Факторы, влияющие на электронные спектры поглощения

49. Правило Вудворда-Физера

. Критерии оценки (в баллах) лабораторных занятий

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;

- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе;

- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе;

- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;

- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;

- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе.

Задания для контрольной работы

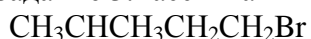
Тема: Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

Вариант 1

Задание 1. Установите структуру соединения C_3H_5NO по его спектру ПМР :2,6(триплет);3,8(триплет);4,3(уширенный сигнал);соотношение интенсивностей сигналов 2:2:1.

Задание 2. Построить ПМР –спектр соединения: $C_6D_5-CHDSCCH_2COOD$.

Задание 3. Рассчитать химические сдвиги углерода в соединении :



Вариант 2

Задание 1. По данным спектра ПМР (два синглета при 3,9 и 7,9 м.д.) и брутто-формуле $C_2H_4OCl_2$ установите строение соединения.

Задание 2. Построить ПМР-спектр соединения: $C_6H_5CHDCl_2NHCOCH_2D$

Тема: Масс-спектрометрия

Вариант 1 .

Задание 1. Определите структуру соединения $C_{10}H_{14}$ по данным масс-спектра (m/e): 134(28); 119(100); 91(48); 79(12); 77(12); 65(8).

Задание 2. Как образуются ионы с m/e 45 и 59 при распаде втор-бутилового эфира?

Вариант 2

Задание 1. Определите структуру соединения C_8H_{16} по данным масс-спектра (m/e): 112(12); 97(12); 71(5); 57(100); 41(44); 29(22).

Задание 2. Как образуются ионы с m/e 44 и M-1 при распаде масляного альдегида?

Тема : ИК-спектроскопия

Вариант 1

Задание 1. Определите строение соединения C_3H_7ClO по данным ИК-спектра

Задание 2. Соотнесите данные ИК-спектра со структурой фенола

Вариант 2

Задание 1. Определите строение соединения C_6H_6ClN по данным ИК-спектра

Задание 2. Соотнесите данные ИК-спектра со структурой метанола

Тема: УФ-спектроскопия

Задание 1. Рассчитайте максимальную длину волны для соединения

Задание 2. Рассчитайте максимальную длину волны для соединения

Критерии оценки (в баллах):

- 0 баллов ставится за отсутствие решение двух задач
- 1 балл ставится за неполное решение одной задачи
- 2 балла ставится за неполное решение двух задач
- 3 балла ставится за верное решение одной задачи
- 4 балла ставится за верное решение одной задачи и неполное решение двух задач
- 5 баллов ставится за верное решение обеих задач

Вопросы к коллоквиуму 1

Электронная УФ спектроскопия

Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-

Физера. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

Колебательная ИК спектроскопия

Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, COHal, NO₂, C≡N. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 см⁻¹).

Вопросы к коллоквиуму 2

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом I=1/2: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A₂, AX, AB и A₂B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H–H}. Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ¹³C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C–H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ¹³C. Константы спин-спинового взаимодействия J_{C–H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ¹³C.

Масс-спектрометрия

Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада

органических соединений под электронным ударом: простой разрыв связей (α -разрыв, бензильный и аллильный разрывы), ретро-реакция Дильса-Альдера, перегруппировка Мак-Лафферти, скелетные перегруппировки, ониевые реакции. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z . Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хромато-масс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

Спектрометрическая идентификация органических соединений (совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ^{13}C спектроскопии)

Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов. Алгоритм структурного анализа. Примеры решения задач структурного анализа, имеющих различную степень сложности

Критерии оценки (в баллах) коллоквиумов

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 10 баллов выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 15 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 20 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 25 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом разделе дисциплины.

Комплект тестов (тестовых заданий)

1. Тестовый вопрос 1: Рентгенофлуоресцентным методом можно определять начиная с

- а) магния;
- б) кальция;
- в) серы;
- г) железа;

2. Тестовый вопрос 2: Дифракция рентгеновских лучей подчиняется уравнению Вульфа-Брегга

- а) $2d\sin\theta = n\lambda$;
- б) $2d\sin\theta = n\lambda$;
- в) $\lambda = 2d\sin\theta$;
- г) $2d = n\lambda\sin\theta$;

3. Тестовый вопрос 3: Изменение материала анода рентгеновской трубки приводит к изменению

- а) параметра кристаллической решетки;
- б) кристаллографической текстуры;
- в) положения пиков на рентгенограмме;
- г) плотности дислокации;

4. Тестовый вопрос 4: Диапазон длин волн рентгеновского излучения

- а) 0,1-100 Å°;
- б) 100-200 Å°;
- в) 0,01-0,1 Å°;
- г) 1-100 Å°;

5. Тестовый вопрос 5: Тип замещения бензольных соединений можно определить по поглощению в области

- а) 2000-1600 см⁻¹;
- б) 1400-700 см⁻¹;
- в) 3100-2800 см⁻¹;
- г) 1800-1400 см⁻¹;

6. Тестовый вопрос 6: Сопряжение карбонильной группы с кратными связями снижает частоту колебаний $\nu_{C=O}$ на

- а) 20-30 см⁻¹;
- б) 40-50 см⁻¹;
- в) 30-40 см⁻¹;
- г) 10-20 см⁻¹;

7. Тестовый вопрос 7: Типичная область колебаний N-H группы, см⁻¹:

- а) 3500-3300 ;
- б) 400-100;
- в) 3000-2600;
- г) 1200-800;

8. Тестовый вопрос 8: Кюветное отделение размещают между источником излучения и монохроматором

- а) в спектрофотометрах для УФ- области ;
- б) в инфракрасных спектрометрах;
- в) в рентгеновских спектрометрах;
- г) в флуориметрах;

9. Тестовый вопрос 9: Для вычисления максимума полосы поглощения сопряженных углеводородов используется формула

- а) $\lambda_{\text{макс}} = 250 + \sum$;
- б) $\lambda_{\text{макс}} = 217 + \sum$;
- в) $\lambda_{\text{макс}} = 215 + \sum$;
- г) $\lambda_{\text{макс}} = 202 + \sum$;

10. Тестовый вопрос 10: Практическое значение в УФ-спектрометрии имеют переходы, длина волны которых попадает в рабочий диапазон прибора

- а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$;
- б) $\pi \rightarrow \pi^*$ и $n \rightarrow \pi^*$;
- в) $n \rightarrow \sigma^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$;
- г) $\sigma \rightarrow \sigma^*$ и $n \rightarrow \sigma^*$;

11. Тестовый вопрос 11: К хромофорам не относится группа

- а) -NH₂;
- б) -COOH;
- в) >C=O;
- г) -C≡N;

12. Тестовый вопрос 12: Под действием УФ-излучения наиболее легко возбуждаются электроны

- а) обычной π -связи;
- б) σ -связи;
- в) внутренних оболочек;
- г) участвующие в сопряжении;

13. Тестовый вопрос 13: В масс-спектре карбоновых кислот максимальную интенсивность имеет ион с массовым числом

- а) 31 (CH₂=OH)⁺;
- б) 44 (CO₂)⁺;
- в) 45 (COOH)⁺;
- г) 60 (CH₂=C(OH)₂)⁺;

14. Тестовый вопрос 14: Перегруппировка Мак-Лафферти характерна для

- а) алкенов;
- б) изоалканов;
- в) альдегидов;
- г) спиртов;

15. Тестовый вопрос 15: g-фактор спектроскопического расщепления для свободного электрона принимает значение, равное

- а) 2,00232;
- б) 2,0036;
- в) 2,00059;
- г) 2,00186;

16. Тестовый вопрос 16: Магнитными свойствами не обладает ядро

- а) ¹³C;
- б) ¹⁹F;
- в) ¹²C;
- г) ³¹P;

17. Тестовый вопрос 17: Дейтерированные растворители влияют на

- а) химический сдвиг сигнала;
- б) мультиплетность сигнала;
- в) интегральную интенсивность;
- г) константу спин-спинового взаимодействия;

18. Тестовый вопрос 18: Протоны ароматических соединений резонируют в области слабого поля из-за

- а) взаимодействия протонов с π-электронами двойной связи;
- б) сопряженной π-электронной системы;
- в) кольцевого тока;
- г) изменения напряженности магнитного поля;

19. Тестовый вопрос 19: Особенностью метода ЯМР¹³C является:

- а) наличие спин-спинового взаимодействия между углеродными атомами;
- б) наличие спин-спинового взаимодействия между углеродом и протоном;
- в) отсутствие спин-спинового взаимодействия между углеродом и протоном;
- г) появление сверхтонкого расщепления;

20. Тестовый вопрос 20: Ионизацию, разделение ионов и детектирование в масс-спектрометрии проводят при следующих условиях

- а) высокое давление;
- б) нормальное давление и комнатная температура;
- в) нормальное давление и высокая температура;
- г) глубокий вакуум;

Критерии оценки (в баллах):

- 0 баллов выставляется студенту, если не ответил ни на один вопрос;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на 50% вопросов;
- 8 баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на 75% вопросов;
- 10 баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на все вопросы.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. П.Сильверстейн, Ф.Вебстер, Д.Кимл. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М. Бином. 2012. - 557с.
2. Основы аналитической химии под ред. Золотова Ю.А., М.: Высш. школа 2010. www.bashedu.ru/Bibliotech.ru/Reader/Book/8167

Дополнительная литература:

3. Аналитическая химия. Проблемы и подходы. Р. Кельнер. Ж.-М. Мерме. М. Мир. 2004. - 726с..
4. Р.Н. Ширяева, Э.Р. Валинурова, А.В. Сидельников. Физические методы анализа. Уфа. РИЦ БашГУ. 2016. - 80с.
5. Р.Н. Ширяева, Э.Р. Валинурова, Ю.Ю. Гайнуллина. Масс-спектрометрический метод анализа. Уфа. РИЦ БашГУ. 2018. - 112с.
6. Р.Н. Ширяева, Э.Р. Валинурова, Л.Б. Резник. Исследование структуры органических молекул методами электронной и инфракрасной спектроскопии. Уфа. РИЦ БашГУ. 2008. - 80с.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License
10. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
<p>учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа:</p> <p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория №305 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), № 311 (химфак корпус), № 405 (химфак корпус)</p>	лекции	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p>Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Mattewhite.</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p>
<p>2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа: лаборатория №316 (химфак корпус); лаборатория №317 (химфак корпус).</p>	Лабораторные занятия	<p>Лаборатория 316 Учебная мебель, Аналитический комплекс ИВА, РМС «Ионометрия» Колорометрия, 2 РН-метра, «Анион-4100»</p> <p>Лаборатория 317 Учебная мебель, РМС «Ионометрия», УЛК «Экологический мониторинг» (учебно-лабораторный комплекс), Потенциостат-Гальваностат Р-8nano, 2 фотоэлектроколориметра КФК 2МП, весы аналитические ОНАУС</p>

<p>3. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311(химфак корпус), аудитория № 310(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p>	<p>Текущий контроль и промежуточная аттестация</p>	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска,ноутбук,мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p>Аудитория№ 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Mattewhite.</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер LenovoThinkCentre A70z IntelPentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPONeos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/ SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p>
<p>4.помещение для самостоятельной работы: читальный зал №1 (главный корпус), читальный зал № 2 (физмат корпус-учебное), читальный зал №5 (гуманитарный корпус), читальный зал №6 (учебный корпус), читальный зал №7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 320 (химфак корпус).</p>	<p>Самостоятельная работа</p>	<p>Читальный зал №1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p>Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., Неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p>Читальный зал №5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p>Читальный зал №6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p>Читальный зал №7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p>Лаборатория №320 Учебная мебель, Рентгенофлуоресцентный спектрометр в комплекте с оборудованием подготовки проб, Аппарат АРН-ЛАТ-03 для разгонки нефтепродуктов , Весы GR-200, Набор ареометров АОН-1, Рефрактометр PAL-2, Ноутбук ASUS</p>

<p>5.помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория 318 (химфак корпус)</p>		<p>Лаборатория № 318 Учебная мебель, МФУ M Samsung лазерный SCX-4623F, Компьютер в составе: системный блок DEPO 460MDi5-650, монитор, клавиатура, мышь, Рефрактометр, набор ариометров, 2 рН-метра АНИОН-4100, 2 рН-метра HI98103 Checker1.</p>
--	--	--

ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫдисциплины Физические методы исследования на 7 семестр
очная

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (з.е. / часов)	3/108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	48
практических/ семинарских	
лабораторных	44
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,7
из них, предусмотренные на выполнение курсовой работы / курсового проекта	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	15,3
из них, предусмотренные на выполнение курсовой работы / курсового проекта	
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	

Форма(ы) контроля:
зачет 7 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоёмкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Спектрометрия ядерного магнитного резонанса (^1H и ^{13}C). Химический сдвиг, его происхождение. Зависимость химического сдвига от различных факторов. Аддитивные схемы расчетов химических сдвигов для алканов, алкенов, производных бензола. Спин –спиновое взаимодействие, его происхождение. Формальный и полуформальный методы расчета интенсивностей линий мультиплета. Методика расшифровки ПМР-спектров ^{13}C . Особенности спектрометрии ЯМР ^{13}C . Получение спектров –полное, частичное подавление спин-спинового взаимодействия с протонами. Химические сдвиги ядер ^{13}C , зависимость их от различных факторов и аддитивные схемы расчетов. Расшифровка спектров ЯМР ^{13}C .	16	-	16	5	Осн.1,2 Доп.3	Проработать литературу 4	Контрольная работа Тест
2.	Электронный парамагнитный резонанс. Особенности спектрометрии ЭПР. g_e -Фактор и закономерности его измерения. Условия резонанса в ЭПР. Сверхтонкое взаимодействие в спектрах ЭПР, его происхождение и	6	-	-	2	Осн.1 Доп.3	Проработать литературу 2	коллоквиум

	основные закономерности расщепления сигнала. Аппаратура							
3.	Масс-спектрометрия. Ионизация молекул и общие закономерности регистрации спектров в масс-спектрометрии. Пики молекулярных ионов и закономерности их образования и интенсивности. Определение брутто-формулы с использованием изотопных ионов. Фрагментация ионов и ее закономерности. Методика по расшифровке масс-спектров.	10	-	14	3	Осн.1 Доп.3	Проработать литературу 5	Контрольная работа Тест
4.	ИК-спектрометрия. Физические основы колебательных переходов в молекулах: гармонические, ангармонические колебания, обертоны. Валентные и деформационные колебания. Число колебаний. Правила отбора. Условия характеристичности колебаний. Основные области ИК-спектра и принципы ее расшифровки. Аппаратура. Приготовление образцов.	10	-	10	3	Осн.1.2 Доп.3	Проработать литературу 6	Контрольная работа Коллоквиум Тест
5	УФ-спектрометрия. Физические основы электронных переходов, их закономерности и классификация. Переходы с переносом заряда. Правила отбора. Хромофоры и ауксохромы. Факторы, влияющие на электронные спектры поглощения: влияние $\pi \rightarrow \pi$ - и $p \rightarrow \pi$ -сопряжения, заместителей, водородной связи, напряженности цикла. Правило Вудворда	6	-	4	2,3	Осн.1,2 Доп.3	Проработать литературу 6	Контрольная работа Тест
	Всего часов:	48		44	15,3			