

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол от № 1 от «25» 01. 2021г.
Зав. кафедрой Талипов Р.Ф.

Согласовано:
Председатель УМК химического
факультета Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина Методы исследования органических соединений

Часть, формируемая участниками образовательных отношений Б1.В.01

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность)
04.03.01 «Химия»

Направленность (профиль) подготовки
Органическая и биоорганическая химия

Квалификация
Бакалавр

Разработчик (составитель) Доцент, к.х.н. (должность, ученая степень, ученое звание)	<u>Фаттахов А.Х.</u> (подпись, Фамилия И.О.)
---	---

Для приема: 2021 г.

Уфа 2021 г.

Составитель: Фаттахов А.Х.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры протокол № 1 от «25» 01. 2021г.

Заведующий кафедрой

Талипов / Талипов Р.Ф.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	
2. 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 с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	
4.3. Рейтинг-план дисциплины	
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	
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

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
	ПК-1. Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов
		ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений
		ПК-1.3. Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам
	ПК-2. Владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ
		ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры
		ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Методы исследования органических соединений» относится к вариативной части.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 7 семестре.

Цели изучения дисциплины: познание студентами физических и теоретических основ спектральных методов (ИК-, КР- УФ- ЯМР-и масс-спектроскопий) и использование этих методов для установления строения и структуры полученных органических соединений, изучения кинетики и механизма реакций, а также познание современных методов расчета теоретических спектров с использованием современных технологий и сравнение их с полученными спектрами.

Для освоения данной дисциплины требуются самые высокие знания, умения и навыки, приобретённые в результате освоения всех предшествующих дисциплин, особенно таких, как органическая химия, стереохимия, физическая химия, математика, информатика, физика, общая химия, неорганическая химия, 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 с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

Код и формулировка компетенции **ПК-1** Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Фрагментарные представления о методах работы в лаборатории	Неполные представления о основных приемах и методах работы в лаборатории	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Сформированные систематические знания о методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов
ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Фрагментарное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	В целом успешное, но не систематическое умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	В целом успешное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам, но отдельные операции вызывают затруднения	Успешное и систематическое умение выполнять стандартные лабораторные операции
ПК-1.3. Владеть навыками	Владеть: навыками выполнен	Фрагментарное владение навыками работы	Владение навыками работы на	В целом успешное, но	Успешное и систематическое

выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	ия стандартных операций по предлагаемым методикам	на стандартном оборудовании	стандартном оборудовании	содержащее отдельные пробелы владения навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	владение навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам
---	---	-----------------------------	--------------------------	--	---

Код и формулировка компетенции **ПК-2**. Владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении и научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов в работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении и научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов в работы, нормы ТБ	Затрудняется в выборе метода применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ, но допускает ошибки	Имеет общее представление о методах применения современной аппаратуры при изучении свойств отдельных классов веществ, правилах безопасного обращения с ними и способах представления результатов эксперимента	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила ТБ при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента, но допускает отдельные	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила техники безопасности и при работе с ними, основные требования к оформлению результатов

				неточности	эксперимент а
ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Умеет проводить некоторые химические эксперименты с использованием современной аппаратуры, но допускает ошибки	Умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры, но допускает отдельные ошибки	Умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры; осуществляет идентификацию и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента с небольшим количеством замечаний	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии с использованием современной аппаратуры; проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента в соответствии с заявленным и требованиями
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении и научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении и научных исследований	Владеет некоторыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, но допускает ошибки	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и изучения свойств отдельных классов веществ (материалов), правильного	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и изучения свойств веществ и материалов, правильного протоколирования опытов

				протоколиро вания опытов	
--	--	--	--	--------------------------------	--

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»;

от 60 до 79 баллов – «хорошо»;

от 80 баллов – «отлично».

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-1.3. Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-2.1. Знать стандартные методы	Знать: стандартные методы	Индивидуальный,

применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест

4.3. *Рейтинг-план дисциплины*

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 2.

Перевод оценки из 100-балльной в пятибалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

Экзаменационные билеты

Экзаменационный билет включает в себя два теоретических вопроса и одну задачу.

Примерные вопросы для экзамена:

1. Теоретический вопрос.
2. Теоретический вопрос.
3. Задача

Примерные вопросы для экзамена:

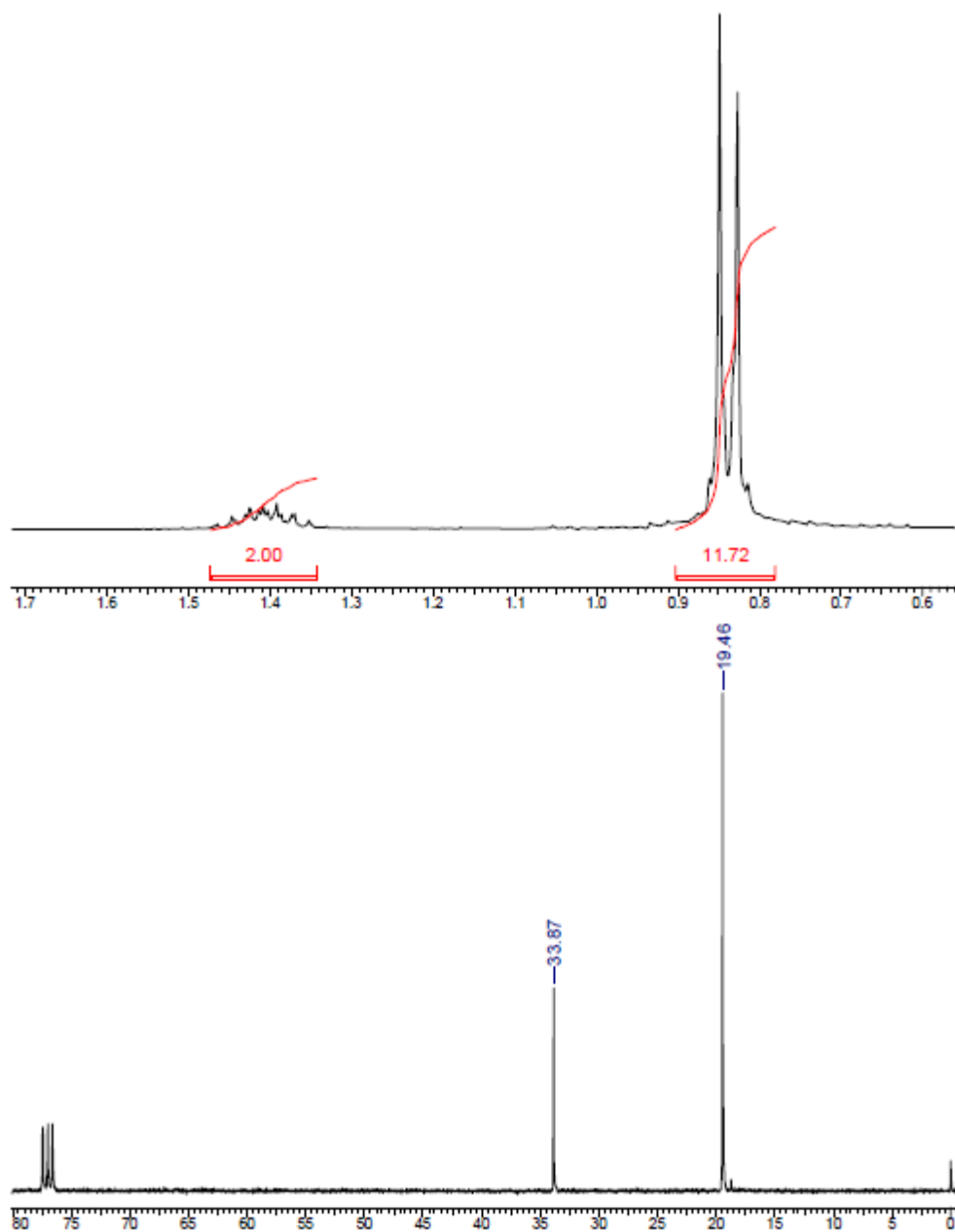
1. Выбор оптимальных условий съемки и наиболее распространенные недостатки ИК-спектров.
2. Важнейшие характеристики полосы поглощения в области основных частот колебаний биоорганических молекул.
3. Проведение структурного анализа по ИК-спектрам.
4. Спектры комбинационного рассеяния (КР) света. Условия съемки и формы записи ИК-спектров.
5. Исследование спектров КР для структурного анализа.
6. Электронные спектры. Спектры поглощения в ультрафиолетовом и видимом областях (УФ-спектры). Условия получения и способы изображения электронных спектров.
7. Структура биоорганических молекул и электронные хромофоры и ауксохромы.
8. Краткая характеристика избирательного поглощения различных структурных элементов органических молекул.
9. Исследование электронных спектров для определения строения биоорганических молекул.
10. Спектры ПМР. Химический сдвиг и его измерение.

11. Число сигналов. Эквивалентные и неэквивалентные протоны. Площадь пика и определение числа протонов.
12. Расщепление сигналов. Спин-спиновое взаимодействие. Зависимость спин-спинового взаимодействия от структуры.
13. Связь химического сдвига и КССВ со строением молекул: влияние электронной плотности на соседних атомах углерода, влияние индуцированных магнитных моментов соседних атомов и групп.
14. Эффект кольцевого тока в циклически сопряженных π -системах.
15. Химические сдвиги под влиянием водородной связи, влияние ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Эффект растворителя.
16. Эмпирические константы заместителей. Магнитная анизотропия циклопропанового кольца.
17. Геминальные и вицинальные КССВ.
18. Дальние КССВ. Спин-спиновое взаимодействие через пространство.
19. Классификация спиновых систем. Спектры I и II-го порядка. АВ- и АВХ-спектры.
20. Общие принципы анализа спектров более сложных спиновых систем.
21. Релаксационные эффекты. Продольные и поперечные релаксации.
22. Динамические эффекты в спектрах ЯМР.
23. Измерение константы скорости первого порядка методом интегрирования.
24. Внутренняя динамика органических молекул: заторможенное внутреннее вращение, инверсия конфигурации, цикла, валентная таутомерия.
25. Двойной резонанс. Применение ЯМДР для установления строения органических молекул.
26. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса парамагнитных веществ. ПСДР (шифт-реагент).
27. Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Химический сдвиг.
28. Спин-спиновое взаимодействие ^{13}C .
29. Влияние хиральности на спектры ЯМР.
30. Экспериментальный аспект спектроскопии ЯМР. Приготовление образца и ампулы. Внутренние и внешние стандарты. Влияние растворителя. Измерение спектров при различных температурах.
31. Масс-спектрометрия. Выбор оптимальных условий записи масс-спектров.
32. Основные закономерности фрагментации органических молекул при $^{\bullet}$ электронном ударе.
33. Интерпретация масс-спектров при структурном анализе.
34. Анализ области молекулярного иона.
35. Определение гомологических серий и альтернативных брутто-формул.
36. Анализ массовых чисел осколочных фрагментов.

37.

Пример задачи

Соединение C_6H_{14} имеет спектры, приведенные ниже. Установите его структуру.



Образец экзаменационного билета:

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Направление 04.03.01 «Химия»

Дисциплина Методы исследования органических соединений

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Выбор оптимальных условий съемки и наиболее распространенные недостатки ИК-спектров.
2. Классификация спиновых систем. Спектры I и II-го порядка. АВ- и АВХ- спектры.
3. Задача 1

Зав. кафедрой органической и биоорганической химии
Талипов

Р.Ф.

Кафедра органической и биоорганической химии

Критерии оценки (в баллах):

Критерии и методика оценивания (в баллах):

- 25-30 баллов выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;

- 17-24 баллов выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;

- 10-16 баллов выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;

- 1-10 баллов выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Индивидуальный опрос проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации.

Групповой опрос проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации, поддержания внимания слушающей аудитории.

Критерии оценки (в баллах) индивидуального и группового опроса:

- 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.

Вопросы для индивидуального и группового опроса

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, CNO, COOH, COOR, CONa, 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).

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 ^{13}C , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H} , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C 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 ^{13}C . Константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H} , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C 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 ^{13}C .

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 хроматомасс-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

Коллоквиум проводится после изучения раздела дисциплины с целью комплексной оценки полученных знаний по разделу.

Критерии оценки (в баллах) коллоквиумов

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 8 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 10 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом разделе дисциплины.

Коллоквиум 1

Вопросы к коллоквиуму 1

1. Выбор оптимальных условий съемки и наиболее распространенные недостатки ИК-спектров.
2. Важнейшие характеристики полосы поглощения в области основных частот колебаний биоорганических молекул.
3. Проведение структурного анализа по ИК-спектрам.
4. Спектры комбинационного рассеяния (КР) света. Условия съемки и формы записи ИК-спектров.
5. Исследование спектров КР для структурного анализа.
6. Электронные спектры. Спектры поглощения в ультрафиолетовом и видимом областях (УФ-спектры). Условия получения и способы изображения электронных спектров.
7. Структура биоорганических молекул и электронные хромофоры и ауксохромы.
8. Краткая характеристика избирательного поглощения различных структурных элементов органических молекул.
9. Исследование электронных спектров для определения строения биоорганических молекул.

Коллоквиум 2

Вопросы к коллоквиуму 2

1. Спектры ПМР. Химический сдвиг и его измерение.
2. Число сигналов. Эквивалентные и неэквивалентные протоны. Площадь пика и определение числа протонов.
3. Расщепление сигналов. Спин-спиновое взаимодействие. Зависимость спин-спинового взаимодействия от структуры.
4. Связь химического сдвига и КССВ со строением молекул: влияние электронной плотности на соседних атомах углерода, влияние индуцированных магнитных моментов соседних атомов и групп.
5. Эффект кольцевого тока в циклически сопряженных π -системах.
6. Химические сдвиги под влиянием водородной связи, влияние ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Эффект растворителя.
7. Эмпирические константы заместителей. Магнитная анизотропия циклопропанового кольца.
8. Геминальные и вицинальные КССВ.
9. Дальние КССВ. Спин-спиновое взаимодействие через пространство.
10. Классификация спиновых систем. Спектры I и II-го порядка. АВ- и АВХ-спектры.
11. Общие принципы анализа спектров более сложных спиновых систем.
12. Релаксационные эффекты. Продольные и поперечные релаксации.
13. Динамические эффекты в спектрах ЯМР.
14. Измерение константы скорости первого порядка методом интегрирования.
15. Внутренняя динамика органических молекул: заторможенное внутреннее вращение, инверсия конфигурации, цикла, валентная таутомерия.
16. Двойной резонанс. Применение ЯМДР для установления строения органических молекул.
17. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса парамагнитных веществ. ПСДР (шифт-реагент).
18. Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Химический сдвиг.
19. Спин-спиновое взаимодействие ^{13}C .

20. Влияние хиральности на спектры ЯМР.
21. Экспериментальный аспект спектроскопии ЯМР. Приготовление образца и ампулы. Внутренние и внешние стандарты. Влияние растворителя. Измерение спектров при различных температурах.
22. Масс-спектрометрия. Выбор оптимальных условий записи масс-спектров.
23. Основные закономерности фрагментации органических молекул при электронном ударе.
24. Интерпретация масс-спектров при структурном анализе.
25. Анализ области молекулярного иона.
26. Определение гомологических серий и альтернативных брутто-формул.
27. Анализ массовых чисел осколочных фрагментов.

Комплект тестов

Тестирование применяются для оценки умения применять полученные задания на практике.

Критерии оценки (в баллах) :

- 10 баллов выставляется студенту, если в результате тестирования набрано от 21 до 25 тестовых баллов;
- 8 баллов выставляется студенту, если в результате тестирования набрано от 16 до 20 тестовых баллов;
- 6 баллов выставляется студенту, если в результате тестирования набрано от 11 до 15 тестовых баллов;
- 4 баллов выставляется студенту, если в результате тестирования набрано от 6 до 10 тестовых баллов;
- 2 баллов выставляется студенту, если в результате тестирования набрано от 1 до 5 тестовых баллов;
- 0 баллов выставляется студенту, если в результате тестирования набрано 0 тестовых баллов;

Пример тестового задания

1. Укажите единицу измерения спин-спинового взаимодействия
 - А. м.д.
 - Б. кДж-моль
 - В. Ts
 - Г. см⁻¹

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

Основная литература:

1. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса / Ю.А. Устынюк. - Москва : Техносфера, 2016. - Ч. 1. Вводный курс. - 292 с. : ил., табл., схем. - (Мир химии). - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-94836-410-0 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=444862>
2. Зайнуллин, Р.А. Применение спектроскопии в органической химии [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Р.А. Зайнуллин, О.С. Куковинец, Р.В. Кунакова; АН РБ, Отделение химии. — Уфа: Гилем, 2007. — Электрон. версия печ. публикации. — <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Zaynullin R.A. Kukovinec O.S. Kunakova R.V.Primenenie spektroskopii v organicheskoy himii. -Ufa Gilem, 2007.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Zaynullin_R.A._Kukovinec_O.S._Kunakova_R.V.Primenenie_spektroskopii_v_organicheskoy_himii._Ufa_Gilem,_2007.pdf)>.

Дополнительная литература:

3. Х. Гюнтер. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: «Мир» 1984. 480 с.
4. А. Гордон, Р. Форд Спутник химика. Физико-химические свойства, методики, библиография. М.: «Мир», 1978.
5. Ширяева, Р.Н. Физические методы анализа [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Р.Н. Ширяева, Э.Р. Валинурова, А.В. Сидельников. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2016. — Электрон. версия печ. публикации. — <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/local/Shirjaeva Valinurova Sidelnikov Fizicheskie metody analiza up 2016.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/local/Shirjaeva_Valinurova_Sidelnikov_Fizicheskie_metody_analiza_up_2016.pdf)>.
6. Казицына, Лидия Александровна. Применение УФ-, ИК-и ЯМР-и масс-спектроскопии в органической химии : учеб. пособие для хим. спец. / Л. А. Казицына, Н. Б. Куплетская .— Изд. 2-е, перераб. и доп. — М. : МГУ, 1979

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

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. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU

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>аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311(химфак корпус), аудитория № 310(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус).</p>	лекции	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p>Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p>Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>
<p>учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311(химфак корпус), аудитория № 310(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус).</p>	групповая, индивидуальная консультация	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p>Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p>Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>

<p>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 № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (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, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p>Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p>Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium 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>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 217 (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, 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 №217 Учебная мебель, Генератор водорода, Насос вакуумный, Весы лабораторные ONAUS PA-214 C, Аналого-цифровой</p>

		преобразователь АЦП-2, Деионизатор воды ДВ-10UV, Комплекс хроматографический газовый «ХРОМОС» ГХ-1000 , Компрессор, Магнитная мешалка 3-х секционная с подогревом ULAB US-3110, Магнитная мешалка MS-H280-Pro, Автоматический поляриметр Atago AP-300, Ноутбук ASUS количество посадочных мест – 10.
помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования лаборатория 217 (химфак корпус)		Лаборатория №217 Учебная мебель, Генератор водорода, Насос вакуумный, Весы лабораторные ONAUS PA-214 С, Аналого-цифровой преобразователь АЦП-2, Деионизатор воды ДВ-10UV, Комплекс хроматографический газовый «ХРОМОС» ГХ-1000 , Компрессор, Магнитная мешалка 3-х секционная с подогревом ULAB US-3110, Магнитная мешалка MS-H280-Pro, Автоматический поляриметр Atago AP-300, Ноутбук ASUS

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Методы исследования органических соединений

на 7 семестр

очная

форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	4/144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	109,2
лекций	54
практических/ семинарских	-
лабораторных	54
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем)(ФКР)	1,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	9
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	25,8

Форма(ы) контроля:
экзамен 7 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятел ьной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Инфракрасные спектры	9	-	9	2	[1-7]	1-10 [6]	Индивидуальный опрос
2.	Спектры комбинационного рассеивания	9	-	9	2	[1-7]	11-20 [6]	Индивидуальный, групповой опрос
3.	Электронные (УФ-) спектры.	9	-	9	2	[1-7]	21-35 [6]	Групповой опрос
4.	Спектры протонного магнитного резонанса (ПМР)-спектры	9	-	9	1	[1-7], [9-14]	40-55 [6]	Индивидуальный опрос
5	Спектры ядерного магнитного резонанса (ЯМР) ¹³ C.	9	-	9	1	[1-13]	56-60 [6]	Индивидуальный, групповой опрос
6	Масс-спектрометрия.	9	-	9	1	[1-7]	61-70 [6]	Групповой опрос
	Всего часов:	54		54	9			

РЕЙТИНГ-ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫМетоды исследования органических соединений

Направление 04.03.01 «Химия»

курс 4 , семестр 7

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			минимальный	максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Индивидуальный опрос	5	2	0	10
2. Групповой опрос	5	2	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	10	1	0	10
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Индивидуальный опрос	5	2	0	10
2. Групповой опрос	5	2	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	10	1	0	10
Тест	10	1	0	10
Поощрительные баллы				
1. Студенческая олимпиада	5	1	0	5
2. Публикация статей	5	1	0	5
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)			0	-10
Итоговый контроль				
Экзамен	30	1	0	30