

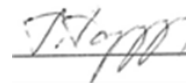
МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:  
на заседании кафедры аналитической химии  
протокол №8 от «17» января 2022 г.

Согласовано:  
Председатель УМК химического факультета



Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ /Майстренко  
В.Н.



/Гарифуллина Г.Г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Дисциплина      Физические методы исследования

Обязательная часть Б1.О.30

**программа бакалавриата**

Направление подготовки (специальность)

04.03.01 «Химия»

*(указывается код и наименование направления подготовки (специальности))*

Направленность (профиль) подготовки

Аналитическая химия

Физическая химия


Органическая и биорганическая химия

Высокомолекулярные соединения

Квалификация

Бакалавр

*(указывается квалификация)*

Разработчик (составитель) Доцент, к.х.н, доцент (должность, ученая степень, ученое звание)	 /Гайнуллина Ю.Ю. (подпись, фамилия И.О.)
--	--


Для приема : 2022 г.

Уфа 2022 г.

Составитель / составители: к.х.н., доцент кафедры аналитической химии Гайнуллина Ю.Ю.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры аналитической химии протокол № 8 от «17» января 2022 г.

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_ 

/ Майстренко В.Н

### Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	6
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	7
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	10
<i>4.3. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)</i>	12
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	16
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	16
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	16
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	17

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных  
спланируемыми результатами освоения образовательной программы  
(с ориентацией на карты компетенций)**

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

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

## **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 аппаратурным 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 с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

**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
<b>ОПК-2.1.</b> 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	Затрудняется в определении базовых понятий и формулировке основных законов химии	Имеет четкое, целостное представление о содержании основных химических курсов и общих закономерностях химических процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин
<b>ОПК-2.2.</b> 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
<b>ОПК-2.3.</b> Проводит стандартные операции для определения химического 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	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

		оформлен ю результатов эксперимен та и норм ТБ	
	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
<b>ОПК-2.4.</b> 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	Затрудняетс я в выборе метода получения, идентифика ции и исследован ия свойств указанного вещества, не знает требований к оформлени ю результатов эксперимен та 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

**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
<b>ОПК-4.1.</b> 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
<b>ОПК-4.2.</b> Обработывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	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
<b>ОПК-4.3.</b> Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	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

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (*для зачета*: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

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



**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**

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	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа, тестирование.
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	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа, тестирование, лабораторная работа, аудиторная и домашняя работа
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 Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа, тестирование, лабораторная аудиторная и домашняя работа
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	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа, тестирование, лабораторная работа аудиторная и домашняя работа
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	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа, тестирование, лабораторная работа аудиторная и домашняя работа
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	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа, тестирование, лабораторная работа
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	Коллоквиум, письменная работа, контрольная работа,

	Владеть: навыками работы с учебной литературой, основной терминологией и понятийным аппаратом базовых математических и естественнонаучных дисциплин	тестирование, лабораторная работа
--	---	-----------------------------------

### 4.3. Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 2.

Перевод оценки из 100-балльной в систему зачет/незачет производится следующим образом:

- зачтено– от 59 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- не зачтено– от 0 до 59 баллов.

#### Критерии оценки (в баллах) аудиторной и домашней работы

- 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 аудиторной и домашней работы

##### 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  $^{13}\text{C}$ . Характеристики ядра.
14. Спин-спиновое взаимодействие.

15. Характерные диапазоны химических сдвигов в методе  $^{13}\text{C}$ .
16. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов.

#### **Занятие №8.**

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

19. Расшифровка спектров ЯМР  $^{13}\text{C}$ .
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

### **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.

## Вопросы к коллоквиуму 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,  $A_2$ ,  $A_X$ ,  $AB$  и  $A_2B$  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  $^{13}C$ .

## Вопросы к коллоквиуму №2

### 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 ( $\alpha$ -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.

## Комплект заданий для контрольной работы

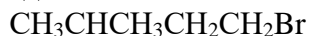
### Тема Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

#### 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:  $C_6D_5-CHDSC_2H_4COOD$ .

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:  $C_6H_5CHD_2CD_2NHCOCH_2D$

Задание 3. Рассчитать химические сдвиги углерода в соединении:  $CH_3C(CH_3)_2CH_2CH(CH_3)_2$

### 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?

Критерии оценки (в баллах):

- 0   баллов выставляется студенту, если студент не решил ни одну задачу;
- 10   баллов выставляется студенту, если решил одну задачу и допустил ошибку в решении второй задачи;
- 20   баллов выставляется студенту, если студент решил две задачи из трех;
- 25   баллов выставляется студенту, если студент правильно решил все задачи

## Комплект тестов (тестовых заданий)

### Тема ЯМР

#### Вариант I

1. Основоположниками ЯМР являются
  - а) М.В. Ломоносов и Д.И. Менделеев
  - б) А. Полинг и А. Байер
  - в) Э. Пёрселл и Ф. Блох
  - г) И. Ньютон и Н. Бор
2. Фундаментальное уравнение магнитного резонанса имеет следующий вид
  - а)  $\nu = \gamma H_0 / 2\pi$
  - б)  $E = mc^2$
  - в)  $\Delta E = h\nu$
  - г)  $J = J_0 \exp(-\epsilon \cdot I \cdot c)$
3. Количество групп эквивалентных протонов в молекуле  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_3$ 
  - а) 1
  - б) 2
  - в) 3
  - г) 4
5. Количество групп эквивалентных протонов в молекуле  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 
  - а) 1
  - б) 2
  - в) 3
  - г) 4
6. При чётных значениях заряда и массового числа ядерный спин принимает значение
  - а)  $J = 3/2$
  - б)  $J = 1/2$
  - в)  $J = 1$
  - г)  $J = 0$
7. Время, за которое система возвращается в исходное состояние, отдав избыток энергии в окружающую среду, называется
  - а) время спин-спиновой релаксации
  - б) время спин-решеточной релаксации
  - в) равновесное время
  - г) характеристическое время
8. Большие времена спин-решеточной релаксации характерны для
  - а) твёрдых образцов
  - б) вязких жидкостей
  - в) невязких жидкостей
  - г) газообразных веществ
9. По аддитивной схеме Шулера можно определить положение сигнала для
  - а) олефиновых протонов
  - б) протонов замещенного бензольного кольца
  - в) производных метана
  - г) ацетиленовых протонов
10. Заселённость энергетических уровней определяется больцмановским распределением
  - а)  $N_1/N_2 = e^{-\Delta E/RT}$
  - б)  $N_2/N_1 = e^{-\Delta E/RT}$

в)  $N_1/N_2 = e^{\Delta E/RT}$

г)  $N_2/N_1 = e^{\Delta E/RT}$

11. Олефиновые протоны имеют сигналы в области

а) 6-8 м.д.

б) 4,5-8 м.д.

в) 2,3-2,9 м.д.

г) 0,5-4,0 м.д.

12. Конусы анизотропии возникают в молекуле

а) циклогексана

б) этанола

в) диэтилового эфира

г) бензола

13. Геминальная константа спин-спинового взаимодействия от угла между связями

а) увеличивается

б) уменьшается

в) проходит через максимум

г) остаётся постоянной

14. Константа спин-спинового взаимодействия измеряется в

а) герцах

б) м.д.

в) нм

г) см<sup>-1</sup>

15. Константы спин-спинового взаимодействия Н-Д меньше, чем соответствующие константы взаимодействия Н-Н в

а) 6,55 раз

б) 4 раза

в) 10 раз

г) 3 раза

16. В ЯМР-спектроскопии используется излучение диапазона

а) рентгеновского

б) ультрафиолетового

в) радиодиапазона

г) видимого

17. Не относится к магнитноактивным нуклид

а) <sup>1</sup>H

б) <sup>12</sup>C

в) <sup>13</sup>C

г) <sup>15</sup>N

18. ЯМР-спектроскопия используется, в основном в

а) элементном анализе

б) структурном анализе

в) количественном анализе

г) молекулярном анализе

19. В ЯМР-спектрометрии отсутствует

а) магнит

б) генератор радиочастоты

в) приёмник и усилитель радиочастоты

г) атомизатор

20. ЯМР-спектр представляет с собой зависимость величины поглощения от

а) длины волны

б) напряжённости магнитного поля

в) частоты



г) химического сдвига

### Вариант II

- Низкая чувствительность метода ЯМР объясняется:
  - формулой Эйнштейна
  - малой вероятностью спектральных переходов
  - низким содержанием магнитных ядер в образце
  - правилами отбора
- Уширение линий поглощения при медленном обмене объясняется:
  - тепловым уширением
  - влиянием электронных токов
  - соотношением неопределенностей для времени и энергии
  - усреднением поля атомного окружения
- Тип спиновой системы пара - дифторэтилена (фтор- магнитное ядро)
  - $A_2B_2$
  - $AA'BB'$
  - $A_2X_2$
  - $AA'XX'$
- Константа спин – спинового взаимодействия между вицинальными протонами  $H_A - C - C - H_B$  от угла между плоскостями, в которых лежат атомы,  $H_A - C - C$  и  $C - C - H_B$ 
  - уменьшается
  - увеличивается
  - проходит через максимум при  $< 90^\circ$
  - проходит через минимум при  $< 90^\circ$
- Для усреднения внешних полей в ЯМР - экспериментах можно использовать:
  - растворение исследуемого вещества в жидкости
  - вращение ампулы с исследуемым веществом
  - и то, и другое
  - ни то, ни другое не позволяют усреднить внешнее поле
- В результате чего протоны ароматических соединений резонируют в областях слабого поля?
  - взаимодействия протонов с  $\pi$ - электронами двойной связи
  - сопряженной  $\pi$ - электронной системы
  - кольцевого тока
  - изменения напряженности постоянного магнитного поля
- Экранирование протонов алифатических связей  $C - H$  в ряду  $CH_3$ ,  $CH_2$ ,  $CH$ 
  - увеличивается
  - остается неизменной
  - уменьшается
  - проходит через максимум
- Чем характеризуется собственное магнитное поле вращающегося ядра?
  - магнитным сдвигом
  - электрическим моментом
  - магнитным моментом
  - химическим сдвигом
- Стандарт при записи ЯМР – спектра необходимы для:
  - измерения химических сдвигов
  - уточнения начала шкалы химических сдвигов
  - настройки спектрометра
  - измерения спин – спиновых констант
- Времена спин – решеточной  $T_1$  и спин – спиновой релаксации  $T_2$  подчинены соотношению:
  - $T_1 \ll T_2$
  - $T_1 \gg T_2$

- в)  $T_1 \geq T_2$   
 г)  $T_1 \leq T_2$
11. Спиновое квантовое число ядра ( $J$ ) определяется :
- числом электронов в атоме
  - числом протонов в нем
  - числом протонов и электронов
  - числом энергетических уровней
12. Шимитирующие катушки в ЯМР – экспериментах применяется для
- усиления постоянного магнитного поля
  - сглаживания неоднородностей постоянного поля
  - стабилизации частоты переменного поля
  - увеличения регистрируемого сигнала
13. Какая формулировка верна для  $T_1$ - времени спин – решеточной релаксации ?
- не зависит от агрегатного состояния
  - обратно пропорционально температуре
  - не зависит от вязкости
  - прямо пропорционально температуре
14. Химический сдвиг 2,1 м.д в спектре уксусной кислоты принадлежит
- протону ОН – группы
  - одному протону  $\text{CH}_3$  – группы
  - двум протонам  $\text{CH}_3$  – группы
  - трем протонам  $\text{CH}_3$  – группы
15. В спектре ЯМР метильная группа молекулы хлорэтана имеет химический сдвиг
- 1,0
  - 1,5
  - 2,5
  - 3,4
16. Какое из суждений является правильным? Величина константы спин – спинового взаимодействия
- не зависит от напряженности магнитного поля
  - не зависит от конфигурации молекул
  - не зависит от числа ковалентных связей, которые разделяют взаимодействующие протоны
  - уменьшается при переходе от одинарных связей к двойным связям
17. В спектре уксусной кислоты резонансный сигнал протонов  $\text{COOH}$ - группы характеризуется сдвигом ( б,м,д)
- 4,0
  - 7,27
  - 8,5
  - 11,0
18. Особенностью метода ЯМР  $^{13}\text{C}$  является
- наличие спин – спинового взаимодействия между углеродом и протоном
  - наличие спин – спинового взаимодействия между протонами
  - отсутствие спин – спинового взаимодействия между углеродом и протоном
  - появление сверхтонкого расщепления
19. Олефиновые протоны имеют сигналы в области
- 4,5 – 8,0 м.д
  - 6,0 – 8,0 м.д
  - 2,3 – 2,9 м.д
  - 9,6 – 10,1 м.д
20. Вещество, имеющее в спектре ПМР, сигналы при 0,95 м.д (триплет), 2,03 м.д.(синглет), 4,05 м.д. (квадруплет), называется
- нитропропаном

- б) этилацетатом
- в) 2- нитробутаном

г) пентеном

Критерии оценки (в баллах):

- \_\_0\_\_ баллов выставляется студенту, если не ответил ни на один вопрос;
- \_\_10\_\_ баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на 50% вопросов;
- \_\_15\_\_ баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на 75% вопросов;
- \_\_20\_\_ 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. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. Физические методы исследования в химии. М. Мир. 2006. - 683 с.
2. М. Отто. Современные методы аналитической химии. М. Техносфера. 2008. - 544 с.
3. Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М. Бином. 2012. - 557 с.

#### Дополнительная литература:

4. Аналитическая химия. Проблемы и подходы. Р. Кельнер. Ж.-М. Мерме. М. Мир. 2004. - 726 с.
5. А. Т. Лебедев. Масс-спектрометрия в органической химии. М. Бином. 2003. - 493 с.
6. А. А. Ищенко. Аналитическая химия. Физико-химические методы анализа. Т. 2. Академия. 2010. - 416 с.
7. В. А. Васильев. Аналитическая химия. Кн. 2. Дрофа. 2005, 2007, 2008.
8. Основы аналитической химии. Т. 2. под ред. Ю. А. Золотова. 2012. Академия.
9. В. И. Вершинин, И. В. Власова, И. А. Никифорова. Аналитическая химия. Академия. 2010. - 448 с.
10. О. Преч, Ф. Бюльманн, К. Афвольтер. Определение строения органических соединений. М. Мир. 2009. - 398 с.
11. Р. Н. Ширяева, Э. Р. Валинурова, А. В. Сидельников. Физические методы анализа. Уфа. РИЦ БашГУ. 2016. - 80 с.
12. Р. Н. Ширяева, Э. Р. Валинурова, Ю. Ю. Гайнуллина. Масс-спектрометрический метод анализа. Уфа. РИЦ БашГУ. 2018. - 112 с.
13. Р. Н. Ширяева, Э. Р. Валинурова, Л. Б. Резник. Исследование структуры органических молекул методами электронной и инфракрасной спектроскопии. Уфа. РИЦ БашГУ. 2008. - 80 с.

### 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](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. Антиплагиат ВУЗ. Договор №81 от 27.04.2018 г. Срок действия лицензии до 04.05.2019
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**

№ п/п	Наименование дисциплины (модуля), практик в соответствии с учебным планом	Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
	Физические методы исследования	<p><b>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа:</b> аудитория №305 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), № 311 (химфак корпус), № 405 (химфак корпус)</p> <p><b>2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа:</b> лаборатория №316 (химфак корпус); лаборатория №317 (химфак корпус).</p> <p><b>3. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации:</b> 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><b>4. помещение для самостоятельной работы:</b> читальный зал №1 (главный корпус), читальный зал № 2 (физмат корпус-учебное), читальный зал №5 (гуманитарный корпус), читальный зал №6 (учебный корпус),</p>	<p><b>Аудитория № 405</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p><b>Аудитория № 311</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Mattewhite.</p> <p><b>Аудитория № 310</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p><b>Аудитория № 305</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p><b>Лаборатория 316</b> Учебная мебель, Аналитический комплекс ИВА, РМС «Ионометрия» Колорометрия, 2 РН-метра, «Анион-4100»</p> <p><b>Лаборатория 317</b> Учебная мебель, РМС «Ионометрия», УЛК «Экологический мониторинг» (учебно-лабораторный комплекс), Потенциостат-Гальвонастат Р-8nano, 2 фотоэлектроколориметра КФК 2МП, весы аналитические ОНАUS</p> <p><b>Аудитория № 004</b></p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License</p>

		<p>читальный зал №7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 320 (химфак корпус).  <b>5.помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования:</b>  лаборатория 318 (химфак корпус)</p>	<p>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.  <b>Аудитория № 005</b>  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.  <b>Читальный зал №1</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт,неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.  <b>Читальный зал №2</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.  <b>Читальный зал №5</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.  <b>Читальный зал №6</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.  <b>Читальный зал №7</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.  Лаборатория №320  Учебная мебель, Рентгенофлуоресцентный спектрометр в комплекте с оборудованием подготовки</p>	
--	--	---	--	--

			<p>проб, Аппарат АРН-ЛАТ-03 для разгонки нефтепродуктов, Весы GR-200, Набор ареометров АОН-1, Рефрактометр PAL-2, Ноутбук ASUS</p> <p><b>Лаборатория № 318</b></p> <p>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>	
--	--	--	--	--

Приложение № 1

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины Физические методы исследования  
на 7 семестр  
очная  
форма обучения

<b>Вид работы</b>	<b>Объем дисциплины</b>
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	108/3
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	92,7
лекций	48
практических/ семинарских	-
лабораторных	44
других ( групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,7
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся( СР)	15,3
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( <sup>1</sup> Н и <sup>13</sup> С)	20	-	16	5	[1-7]	1.11-1.17 [11]	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум, тестирование
2.	ЯМР <sup>13</sup> С	15	-	-	5,3	[1,8]		Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум, тестирование
3.	Масс-спектрометрия	13	-	14	5	[1,4,5,9]	21-34 [12]	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум, тестирование
	<b>Всего часов:</b>	<b>48</b>		<b>44</b>	<b>15,3</b>			

**РЕЙТИНГ-ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫ**Физические методы исследования

Специальность 04.03.01 «Химия»

курс 4, семестр 7 2021 /2022 гг.

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			минимальный	максимальный
<b>Модуль 1</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
1. Аудиторная работа	5	3	0	15
2. Домашняя работа	5	2	0	10
<b>Рубежный контроль</b>				
Коллоквиум	25	1	0	25
<b>Модуль 2</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
1. Аудиторная работа	5	3	0	15
2. Домашняя работа	5	2	0	10
<b>Рубежный контроль</b>				
Коллоквиум	25	1	0	25
<b>Поощрительные баллы</b>				
1. Студенческая олимпиада				
2. Публикация статей				
3. Работа со школьниками (кружок, конкурсы, олимпиады)				
<b>Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)</b>				
1. Посещение лекционных занятий	<b>-0,7</b>	<b>8</b>	<b>0</b>	<b>-6</b>
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)	<b>-0,2</b>	<b>44</b>	<b>0</b>	<b>-10</b>