

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

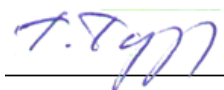
Утверждено:
на заседании кафедры
протокол №8 от «17» 01.2022 г.

Зав.кафедрой



/Майстренко В.Н.

Согласовано:
Председатель УМК факультета /института



/ Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина Физические методы исследования

Обязательная часть Б1.О.30

программа специалитета

Направление подготовки (специальность)
04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Направленность (профиль) подготовки

Аналитическая химия


Биоорганическая химия

Высокомолекулярные соединения

Неорганическая химия

Квалификация

Химик. Преподаватель

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

Для приема: 2022 г.

Уфа 2022 г.

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

Рабочая программа дисциплины *утверждена* на заседании кафедры протокол №8 от «17» 01. 2022 г.

Заведующий кафедрой

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

Майстренко В.Н.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	6
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	6
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	9
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	19
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	19
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	20
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	20

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) компетенций¹ (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам
		ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин
		ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в

¹ Указывается только для УК и ОПК (при наличии).

			рамках базовых химических дисциплин
<p>ОПК-2 Способен проводить химический эксперимент с соблюдением современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности</p>	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
--	--	--	---------------------------------

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физические методы исследования» относится к обязательной части.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 7,8 семестрах.

Цели изучения дисциплины: *формирование представления о принципиальных основах, практических возможностях и ограничениях важнейших для химиков физических методов исследования процессов и материалов, знакомство с их аппаратным оснащением и условиями проведения эксперимента, с процессами интерпретации и грамотного оценивания экспериментальных данных, в том числе публикуемых в научной литературе.*

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин:

При освоении дисциплины требуются самые высокие знания, умения и навыки, приобретенные в результате освоения предшествующих дисциплин, особенно таких, как органическая химия, физическая химия, строение вещества, аналитическая химия, физика, 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 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-1**. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Незачтено»	«Зачтено»
ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	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

расчетов свойств веществ и материалов	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам	Не умеет	Умеет решать задачи повышенной сложности из базовых курсов химии
	Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Не владеет	Владеет навыками критического анализа учебной информации по основным разделам химии, формулировки выводов и участия в дискуссии по учебным вопросам
ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Не умеет	Умеет прогнозировать результаты несложных последовательностей химических реакций с учетом общих закономерностей процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин
ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Не умеет	Умеет прогнозировать результаты несложных последовательностей химических реакций с учетом общих закономерностей процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин

Код и формулировка компетенции **ОПК-2**. Способен проводить химический эксперимент с соблюдением современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Незачтено»	«Зачтено»
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	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
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	Не владеет	Владеет навыками синтеза, идентификации и изучения свойств веществ и материалов, правильного

	эксперимента и оформления его результатов		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

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-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Контрольная работа Коллоквиум Тест
ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Контрольная работа Коллоквиум Тест
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	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы,	Контрольная работа Коллоквиум Тест

материалов на их основе	<p>нормы ТБ</p> <p>Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам</p>	
ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	<p>Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ</p>	<p>Контрольная работа</p> <p>Коллоквиум</p> <p>Тест</p>

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 дисциплины

Физические методы исследования

(название дисциплины согласно рабочему учебному плану)

специальность 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

курс IV, семестр 8

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				
1. Письменная контрольная работа №1 по ЯМР	5	1	0	5
2. Письменная контрольная работа №2 по масс-спектрометрии	5	1	0	5
3. Коллоквиум по ЯМР и масс-спектрометрии	25	1	0	25
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа	1	5	0	5
2. Тестовый контроль	10	1	0	10
Рубежный контроль				
1. Письменная контрольная работа №3 по ИКС	5	1	0	5
1. Письменная контрольная работа №4 по УФ	5	1	0	5
2. Коллоквиум по ИК-,УФ-спектроскопии	25	1	0	25
Поощрительные баллы				
1. Студенческая олимпиада				
2. Публикация статей				
3. Работа со школьниками (кружок, конкурсы, олимпиады)				
4 ...				
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий	-0,2		0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)	-0,2		0	-10

Планы лабораторных занятий

Вопросы для лабораторных занятий

Занятие № 1

1. Спектрометрия магнитного резонанса
2. Магнитные моменты и спины ядер и электронов

Занятие №2

3. Расщепление энергии электрона и протона в магнитном поле
4. Понятие о спин-решеточной и спин-спиновой релаксации

Занятие №3

5. ПМР-спектрометрия. Химический сдвиг. Эталоны
6. Химически эквивалентные и химически неэквивалентные протоны

Занятие №4

7. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов
8. Основные принципы аппаратного оформления

Занятие №5

9. Спин-спиновое взаимодействие и причины его возникновения
10. Формальный и полуформальный методы расчета интенсивности линий

Занятие №6

11. Геминальные, вицинальные, дальние КССВ
12. Методы упрощения сложных спектров

Занятие №7

13. Принципы расшифровки спектров ПМР
14. Спектрометрия ЯМР¹³С

Занятие №8

15. Аналогия и различия ЯМР ¹³С и ¹Н
16. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов в методе ¹³С

Занятие №9

17. Основные принципы расшифровки спектров ¹³С
18. КССВ и причины их возникновения

Занятие №10

19. ЭПР-спектрометрия. Основные принципы аппаратного оформления
20. Сверхтонкое взаимодействие в спектрах ЭПР

Занятие №11

21. Константы сверхтонкой структуры
22. Основные принципы расшифровки ЭПР-спектров

Занятие №12

23. Масс-спектрометрия. Ионизация молекул
24. Регистрация масс-спектров

Занятие №13

25. Пики молекулярных ионов и закономерности их образования
26. Определение брутто-формулы по изотопным пикам

Занятие №14

27. Фрагментация ионов и основные типы распада
28. Бензильный и оиевый распад

Занятие №15

29. Внутримолекулярные перегруппировки
30. Метастабильные ионы

Занятие №16

31. Основные принципы расшифровки масс-спектров
32. Масс-спектрометрия отрицательных ионов

Занятие №17

33. ИК-спектрометрия. Физические основы колебательных переходов
34. Гармонические и ангармонические колебания. Правило отбора

Занятие №18

35. Условия характеристичности колебаний
36. Влияние ближнего и дальнего взаимодействия на характеристичность колебаний

Занятие №19

37. Валентные и деформационные колебания. Обертоны
38. Основные принципы расшифровки ИК-спектров

Занятие №20

39. Аппаратура, принципиальная схема ИК-спектрометра
40. Техника приготовления образцов

Занятие №21

41. Физические основы электронных переходов
42. Хромофоры и ауксохромы

Занятие №22

43. Факторы, влияющие на электронные спектры поглощения
44. Основные принципы идентификации органических соединений по электронным спектрам

Занятие №23

45. Аппаратура УФ-спектрометрии
46. Аддитивные схемы расчета длины волны

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

Комплект заданий для контрольной работы

Тема: Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Вариант 1

Задание 1. Эфир бромзамещенной кислоты $C_4H_7BrO_2$ имеет следующий спектр ПМР :1,65 (дублет);3,4 (квадруплет); 3,85 (синглет); соотношение интенсивностей сигналов 3:1:3.

Какова структура эфира ?

Задание 2. Построить спектр для соединения: $CD_3-CHDOOCCD_2-CH_2COOCCD_2CH_3$.

Вариант 2

Задание 1. Производное уксусной кислоты $C_5H_{10}O_2$ в спектре ПМР имеет три сигнала :1,05 (дублет);1,95(синглет);4,85 (мультиплет); соотношение интенсивностей 6:3:1. О каком веществе идет речь?

Задание 2. Построить ПМР-спектр соединения: $DN_2CCH_2COCH_2COOSD_2CHD_2$.

Тема: Масс-спектрометрия

Вариант 1

Задание 1. Определить структуру соединения C_8H_{10} по данным масс-спектра (m/e):106(67);105(30);104(4);92(8);91(100);79(8);78(8);77(15);65(8);51(4);39(15).

Задание 2. Определите брутто-формулу соединения, в спектре которого максимален пик молекулярного иона с m/e 110, а пики $M+1$ и $M+2$ имеют интенсивности 7,8 и 4,6 % соответственно.

Вариант 2 .

Задание 1. Определить структуру соединения $C_8H_8O_2$ по данным масс-спектра (m/e):136(34); 92(13); 91(100);77(8);65(12);45(78);39(8);18(12);17(5).

Задание 2. Как образуются ионы с m/e 31 и 56 при распаде *n*-бутилового спирта?

Тема: ИК-спектрометрия

Вариант 1

Задание 1. Определите строение соединения C_4H_7NO по данным ИК-спектра

Задание 2. Произведите отнесение полос поглощения в ИК-спектре пропионитрила

Вариант 2

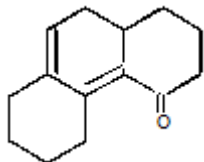
Задание 1. Определите строение соединения $C_9H_{10}O_2$ по данным ИК-спектра

Задание 2. Соотнесите данные ИК-спектра со структурой этилацетата

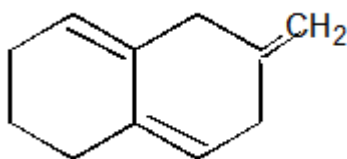
Тема: УФ-спектрометрия

Вариант 1

Рассчитайте максимальную длину волны для соединения



Вариант 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

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 .

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.

Вопросы к коллоквиуму 2

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, CONaI, 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).

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: Расщепление линий в спектре ЭПР происходит на несколько линий СТС происходит в результате

- а) спин-ядерных взаимодействий;
- б) спин-спиновых взаимодействий;
- в) ядерных взаимодействий;
- г) ионных взаимодействий;

2. Тестовый вопрос 2: В ЯМР-спектрометре отсутствует

- а) магнит;
- б) генератор радиочастоты;
- в) приемник и усилитель радиочастоты
- г) атомизатор;

3. Тестовый вопрос 3: Тонкая структура возникает в спектрах у частиц

- а) содержащих один неспаренный электрон;
- б) все электроны в которых спарены;
- в) содержащих несколько неспаренных электронов
- г) любых;

4. Тестовый вопрос 4: В УФ-спектроскопии используются растворители

- а) имеющие поглощение в исследуемой области спектра;
- б) в которых растворяются исследуемые вещества;
- в) вещества, не имеющие поглощения в исследуемой области спектра и не

реагирующие с растворенным веществом;

г) ацетон, бензол, толуол;

5. Тестовый вопрос 5: Хромофорами называют

а) группировки, вызывающие переходы $\sigma \rightarrow \sigma^*$

б) группы, содержащие одинарные связи

в) группировки, вызывающие электронные переходы любого типа

г) группировки, вызывающие избирательное поглощение электромагнитного колебания в видимой и ультрафиолетовой части спектра;

6. Тестовый вопрос 6: Рентгеновские спектры возникают при возбуждении

а) электронов внутренних оболочек;

б) валентных электронов;

в) спинов ядер и электронов;

г) колебательных уровней молекулы;

7. Тестовый вопрос 7: Энергия электронов, испускаемая катодом в рентгеновской трубке составляет

а) 300 кэВ;

б) 10-100 кэВ;

в) 100 кэВ;

г) 10 кэВ;

8. Тестовый вопрос 8: В случае исследования аморфного состояния на рентгенограмме наблюдается формирование

а) набора острых пиков;

б) одного узкого пика;

в) одного широкого пика;

г) набора широких пиков;

9. Тестовый вопрос 9: Методами колебательной спектроскопии исследуются

а) твердые вещества, растворы;

б) газы, растворы, твердые вещества;

в) твердые вещества, растворы, газы, аморфная фаза;

г) твердые вещества, аморфная фаза;

10. Тестовый вопрос 10: Назовите источники, приемники излучения, материал оптики в ИК-области

а) ртутные лампы высокого давления или штифты глобара и Нернста, термоэлементы или болометры, соли щелочных и щелочноземельных металлов;

б) водородная (дейтериевая) лампа, фотоэлемент, кварц;

в) штифты глобара и Нернста, термоэлемент, специальные сорта органического стекла;

г) перикальные лампы, термоэлемент, специальные сорта органического стекла;

11. Тестовый вопрос 11: Наиболее характеристическими в ИК-спектрах хинонов являются полосы

а) валентных колебаний карбонильных групп;

б) валентных колебаний $C=C$ - связей;

в) деформационных колебаний карбонильных групп;

г) деформационных колебаний $C-H$ –связей;

12. Тестовый вопрос 12: Пики изотопных ионов в масс-спектрометрии относительно пиков молекулярного и осколочного ионов

а) смещены в сторону больших массовых чисел;

б) смещены в сторону меньших массовых чисел;

в) возрастают по интенсивности в направлении от меньших к большим массовым числам;

г) убывают по интенсивности от меньших к большим массовым числам;

13. Тестовый вопрос 13: Метод масс-спектрометрии применим

а) установления молекулярной массы вещества;

б) установления молекулярной массы вещества, если в спектре фиксируется молекулярный ион;

в) разделения смесей веществ;

- г) исчерпывающего пространственного структурного анализа;
- 14.Тестовый вопрос 14: Характеристические ИК-полосы поглощения**
- а) отвечают определенным колеблющимся химическим группам и, независимо от различных исследуемых веществ, лежат на определенных частотах;
- б) характеризуют валентную связь;
- в) присутствуют в блочных полимерах;
- г) связаны с определенной конформацией молекулярной цепи;

- 15.Тестовый вопрос 15: Маятниковые колебания метиленовых групп находятся в области**
- а) 720-790 см^{-1} ;
- б) 1300-1400 см^{-1} ;
- в) 2800-3000 см^{-1} ;
- г) 1100-700 см^{-1} ;

- 16. Тестовый вопрос 16: Каждая пара взаимодействующих АО образует**
- а) одну связывающую и одну разрыхляющую МО;
- б) одну МО;
- в) одну связывающую и одну вакантную орбиталь;
- г) одну связывающую и одну несвязывающую МО;

- 17.Тестовый вопрос 17: К хромофорам не относится группа**
- а) $-\text{NH}_2$
- б) $-\text{COOH}$;
- в) $-\text{>C=O}$;
- г) $-\text{C=N-}$;

- 18.Тестовый вопрос 18: Элементы от S до V определяют по линиям**
- а) N-серий;
- б) M-серий;
- в) L-серий;
- г) K-серий;

- 19.Тестовый вопрос 19: Степень фрагментации молекулярного и осколочного ионов**
- а) существенно зависит от способа ионизации;
- б) не зависит от условий эксперимента;
- в) пропорциональна напряженности магнитного поля в масс-анализаторе;
- г) поддается строгому количественному описанию;

- 20.Тестовый вопрос 20: Высокохарактеристическими в спектрах алифатических спиртов, простых эфиров являются ионы**
- а) $[\text{CH}_3\text{-CH}_2]^+$;
- б) $[\text{CH}_2\text{=OH}]^+$;
- в) $[\text{R}_1\text{-O-R}_2]^+$;
- г) $[\text{R-O}]^+$;

Критерии оценки (в баллах):

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не ответил ни на один вопрос;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент дал правильные ответы только 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:

- 1.1. Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. 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. Кельнер Р., Мерме Ж.-М., Отто М., Видмер Г.М.: Мир.2004.-726 с.
4. Ширяева Р.Н., Сагитова Ч.Х. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Уфа. РИЦ БашГУ.2020.-108 с.
5. Ширяева Р.Н., Валинурова Э.Р., Гайнуллина Ю.Ю. Масс-спектрометрический метод анализа. Уфа. РИЦ БашГУ.2018.-112 с.
6. Ширяева Р.Н., Зильберг Р.А., Яркаяева Ю.А., Аллаярова Д.А., Гайнуллина Ю.Ю. ИК- и УФ- спектроскопия. Уфа. РИЦ БашГУ.2021. -129 с.

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 общественная лицензия GNU

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

Наименование специализированных	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
---------------------------------	-------------	---

аудиторий, кабинетов, лабораторий		
<p>1.учебная аудитории 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, экранэлектроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p>Аудитория.№ 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,проектор Mitsubishi XD 600U, экранэлектроприводом 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-Гальвонастат 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>	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<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 Т.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>5.помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория 318 (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>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>
---	-------------------------------	---

Приложение № 1

ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
 ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

очная

форма обучения

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ²

дисциплины Физические методы исследования на 7,8 семестр
 (наименование дисциплины)

очная

²Количество часов/з.е. указывается в соответствии с учебным планом, таблицы заполняются отдельно по каждой форме обучения (очной, очно-заочной, заочной).

Вид работы	Объем дисциплины	
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	4/144	
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:		
лекций	54	
практических/ семинарских		
лабораторных		46
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,5	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	17,5	25,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/ дифференцированному зачету (контроль)		

Форма(ы) контроля:
зачет 8 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 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.	<p>Спектроскопия ЯМР ¹H Магнитные моменты и спины ядер и электронов. Расщепление энергии электронов и протонов во внешнем магнитном поле. Векторная модель магнитного резонанса. Правила отбора. Условия резонанса системы спинов и переменного магнитного поля. 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.</p>	14		14	10	Осн.1,2 Доп.3	Проработать литературу 4	Контрольная работа тест
2.	Спектроскопия ЯМР¹³ C	6		8	5	Осн.1	Проработать	Тест

	Особенности спектроскопии 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 .					Доп.3	литературу 4	коллоквиум
3.	Масс-спектроскопия Ионизация молекул и общие закономерности регистрации спектров в масс-спектроскопии. Пики молекулярных ионов и закономерности их образования и интенсивности. Определение брутто-формулы с использованием изотопных ионов. Фрагментация ионов и ее закономерности. Методика расшифровки масс-спектров.	8		10	10	Осн.1 Доп.3	Проработать литературу 5	Контрольная работа тест
4.	Инфракрасная спектроскопия 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	10		8	5	Осн.1,2 Доп.3	Проработать литературу 6	Контрольная работа тест коллоквиум

	образцов.							
5.	УФ-спектроскопия Физические основы электронных переходов, их закономерности и классификация. Переходы с переносом заряда. Правила отбора. Хромофоры и аукохромы. Факторы, влияющие на электронные спектры поглощения: влияние $\pi \rightarrow \pi$ - и $p \rightarrow \pi$ - сопряжения, заместителей, водородной связи, напряженности цикла. Правило Вудворда	6		6	6,3	Осн.1,2 Доп.3	Проработать литературу 6	Контрольная работа
6.	Спектроскопия комбинационного рассеяния История открытия. Рэлеевское и комбинационное рассеяние. Диаграмма Яблонского. Вид спектров КР. Эмпирические законы КР.	4			2	Доп.3	Проработать литературу 1	Тест
7.	Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) Природа рентгеновских спектров. Классификация рентгеновских методов анализа. Рентгеноэмиссионный и рентгенофлуоресцентный анализ. Закон Вульфа-Брэгга. Оже-электронная спектроскопия	6			5	Осн.2 Доп.3	Проработать литературу 1	Тест
	Всего часов:	54		46	43,3			