

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ИНЖЕНЕРНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры технической химии и
материаловедения протокол №26 от 13.06.2017
г.

Согласовано:
Председатель УМК факультета /института

Зав. кафедрой  /Мухамедзянова А.А.

 / Мельникова А.Я.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Применение спектральных методов анализа в контроле качества
медицинских субстанций и материалов»


Профессиональный цикл, вариативная часть – Б1.В.03

программа магистратуры

Направление подготовки
04.04.02 – Химия, физика и механика материалов

Направленность (профиль) подготовки
Биохимические технологии в производстве материалов

квалификация
магистр

| | |
|---|---|
| Разработчик (составитель) доцент, к.х.н. |  / Мурзагулова Э.И. |
|---|---|

Для приема 2017 г.

Уфа 2017 г.

Составитель: доцент кафедры технической химии и материаловедения,
кандидат химических наук, Мурзагулова Э.И.

Рабочая программа дисциплины актуализирована на заседании кафедры технической химии и материаловедения протокол № 26 от «13» июня 2017 г.

В рабочей программе дисциплины был дополнен список литературы, а также в списке рекомендованной литературы обновлены ссылки на издания, размещенные в ЭБС БашГУ, также были обновлены программное обеспечение и базы данных.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры технической химии и материаловедения, протокол № 1 от «28» августа 2018 г.

Заведующий кафедрой

 / Мухамедзянова А.А.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)
4. Фонд оценочных средств по дисциплине
 - 4.1. Перечень компетенций 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 (при необходимости)*
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

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

| Результаты обучения | Формируемые компетенции | Примечание |
|---------------------|---|--|
| Знания | 1. Теоретические основы современных методов анализа органических соединений, в том числе природных соединений сложного строения; возможности и ограничения использования для установления структуры органических соединений таких методов как ИК- УФ- ЯМР- спектроскопия и масс-спектрометрия | – способность к |
| | 2. Приборную базу физико-химических методов анализа; характеристические полосы основных функциональных групп в ИК-спектрах, изменения их местоположения в зависимости от строения и ближайшего окружения, влияние на ИК-спектр концентрации изучаемого раствора, температуры съемки | абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1); – готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3) |
| | 3. Современные методы, в том числе возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений | |
| Умения | 1. Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений | – владением знаниями в области современных теоретических концепций различных разделов материаловедения, включая методы синтеза веществ и материалов, анализа их структуры и свойств, фундаментальные |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | <p>2. Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания</p> | <p>навыки научно-исследовательской работы (ОПК-2); – владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов,</p> | |
| | <p>3. Самостоятельно выбирать совокупность спектральных методов анализа для получения наибольшей информации о структуре исследуемых соединений</p> | <p>включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных областях материаловедения и в современной технологии материалов (ОПК-3)</p> | |
| <p>Владения (навыки/опыт деятельности)</p> | <p>1. Навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов (ИК- ЯМР- УФ- Хроматомасс- спектрометрии)</p> | <p>– способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4);</p> | |
| | <p>2. Владеть методами и приемами расшифровки спектров</p> | <p>и готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы</p> | |
| | <p>3. Навыками выбора методов для анализа установления структуры органических соединений</p> | <p>исследования и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4); – готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы</p> | |

| | | | |
|--|--|---|--|
| | | <p>химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5);</p> <p>– готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8)</p> | |
|--|--|---|--|

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «*Применение спектральных методов анализа в контроле качества медицинских субстанций и материалов*» относится к вариативной части.

Дисциплина изучается на 1 курсе во 2 семестре.

Целями освоения дисциплины «*Применение спектральных методов анализа в контроле качества медицинских субстанций и материалов*» являются приобретение выпускником знаний в области современных физико-химических методов анализа для установления структуры органических соединений, а также навыков их применения. Выпускник должен получить знания в области современных подходов к установлению структуры органических веществ (определения степени замещения у атомов углерода, расшифровки данных Н-Н, С-Н и С-С-корреляций). Выпускник должен уметь осуществить выбор наиболее информативного метода физико-химического анализа, самостоятельно оценить привлекательность того или иного подхода. Выпускник также должен уметь с привлечением физико-химических методов анализа установить состав получаемой реакционной массы, чтобы далее выбрать оптимальный метод очистки или выделения нужного компонента.

Дисциплина «*Применение спектральных методов анализа в контроле качества медицинских субстанций и материалов*» входит в вариативную часть Образовательной программы подготовки магистров по направлению «Химия, физика и механика материалов», направленности подготовки «Биохимические технологии в производстве материалов». Она находится в логической взаимосвязи, прежде всего, с базовой частью профессионального цикла, поскольку вопросы, касающиеся актуальных проблем химии в области основного органического синтеза, в том числе полимерных материалов и материаловедения, материалов для фарминдустрии не могут быть качественно решены без знания и применения современных физико-химических методов анализа. Знание основных свойств органических соединений позволяет прогнозировать структуру, получающихся в ходе синтеза веществ, что, в свою очередь облегчает интерпретацию спектральных данных. Спектральные характеристики – основной инструмент при установлении структуры синтезируемых сложных органических соединений. Грамотное, профессиональное

применение полученных знаний в области ИК- УФ- и ЯМР-спектроскопии позволяет решать самые актуальные задачи современной химии. При освоении данной дисциплины активно используются знания о возможностях использования современных информационных технологий в образовании и науке, приобретенная способность квалифицированного владения всеми видами научного общения (устного и письменного).

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

органическая, аналитическая, физическая химии, физика.

Дисциплина *«Применение спектральных методов анализа в контроле качества медицинских субстанций и материалов»*, в свою очередь, необходима для освоения таких дисциплин, как *«Асимметрический синтез и катализ - современный метод в производстве медицинских субстанций»*, *«Стереохимия органических соединений»*, *«Фармацевтический анализ и система контроля качества медицинских материалов и лекарственных средств»*, *«Синтетические полимеры для реконструктивной медицины»*, *«Органические реакции на полимерных субстратах»*, а также практик *«Научно-исследовательская работа»*, *«Практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности»*, *«Преддипломная практика»*, при подготовке и защите выпускной квалификационной работы.

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

ОК-1 – способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу

| Этап (уровень) освоения компетенци и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|--|--|---|--|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Теоретические основы спектральных методов исследования. Критерии объединения оптических методов в единый класс, теорию взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. | Не знает теоретических основ спектральных методов исследования, критериев объединения оптических методов в единый класс, теории взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. | Знает теоретические основы спектральных методов исследования, критерии объединения оптических методов в единый класс, теорию взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений. | Не умеет применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений. | Умеет применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии. | Не владеет навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии | Владеет навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии |

ОК-3 – готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала

| Этап (уровень) освоения компетенци и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|--|--|--|--|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Теорию возникновения инфракрасных спектров, квантово-механический подход к описанию колебательных спектров. Фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Правила отбора и интенсивность в ИК-поглощении. Колебания сложных молекул. | Не знает теории возникновения инфракрасных спектров, квантово-механического подхода к описанию колебательных спектров, фундаментальных, обертоновых и составных частоты, правил отбора и интенсивности в ИК-поглощении, колебаний сложных молекул. | Демонстрирует знание теории возникновения инфракрасных спектров, квантово-механического подхода к описанию колебательных спектров, фундаментальных, обертоновых и составных частоты, правил отбора и интенсивности в ИК-поглощении, колебаний сложных молекул. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: Грамотно соотносить сигналы в ИК-спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания. | Не умеет грамотно соотносить сигналы в ИК-спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания. | Умеет грамотно соотносить сигналы в ИК-спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Владеть методами и приемами расшифровки ИК-спектров. | Не владеет методами и приемами расшифровки ИК-спектров. | Владеет методами и приемами расшифровки ИК-спектров. |

ОПК-2 – владением знаниями в области современных теоретических концепций различных разделов материаловедения, включая методы синтеза веществ и материалов, анализа их структуры и свойств, фундаментальные навыки научно-исследовательской работы

| Этап (уровень) освоения компетенци и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|--|---|---|---|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Теорию метода УФ-спектроскопии. УФ-спектроскопия в видимой и УФ-областях. | Не знает теории метода УФ-спектроскопии, УФ-спектроскопию в | Демонстрирует знание теории метода УФ-спектроскопии, УФ-спектроскопию в |

| | | | |
|-----------------------|--|---|---|
| | Характеристики электронных состояний многоатомных молекул. Симметрия и правила запрещенных переходов. Классификация и отнесение электронных переходов. | видимой и УФ-областях, характеристик электронных состояний многоатомных молекул, симметрии и правил запрещенных переходов, классификации и отнесения электронных переходов. | видимой и УФ-областях, характеристик электронных состояний многоатомных молекул, симметрии и правил запрещенных переходов, классификации и отнесения электронных переходов. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: Применять электронные спектры поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. | Не умеет применять электронные спектры поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. | Умеет применять электронные спектры поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Навыками применения электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. | Не владеет навыками применения электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. | Владеет навыками применения электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. |

ОПК-3 – владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях материаловедения и в современной технологии материалов

| Этап (уровень) освоения компетенции и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|---------------------------------------|---|--|---|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного | Не знает спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности, метод | Знает спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности, метод двойного ядерного |

| | | | |
|-----------------------|--|---|--|
| | магнитного резонанса. | двойного ядерного магнитного резонанса. | магнитного резонанса. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР. | Не умеет применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР. | Умеет применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР. | Не владеет навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР. | Владеет навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР. |

ПК-4 – способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений

| Этап (уровень) освоения компетенции и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|---------------------------------------|---|--|---|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Спектроскопию ПМР. Классификацию спиновых систем (номенклатуру спиновых систем), | Не знает или знает фрагментарно спектроскопию ПМР, классификацию спиновых систем | Демонстрирует знание спектроскопии ПМР, классификации спиновых систем (номенклатуры |

| | | | |
|-----------------------|--|--|---|
| | химические сдвиги основных видов протонов органических соединений, спектры первого порядка. спектры ПМР второго порядка, АВ- спектр, АВХ- спектр, нахождение ХС и величины констант ССВ. | (номенклатуру спиновых систем), химические сдвиги основных видов протонов органических соединений, спектры первого порядка, спектры ПМР второго порядка, АВ- спектра, АВХ- спектра, нахождение ХС и величины констант ССВ. | спиновых систем), химических сдвигов основных видов протонов органических соединений, спектров первого порядка, спектров ПМР второго порядка, АВ- спектра, АВХ- спектра, нахождение ХС и величин констант ССВ. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: Расшифровывать предложенные спектры ЯМР ¹ Н органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы. | Не умеет или умеет со значительными ошибками расшифровывать предложенные спектры ЯМР ¹ Н органических соединений, находить параметры спектров ПМР- Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы. | Умеет расшифровывать предложенные спектры ЯМР ¹ Н органических соединений, находить параметры спектров ПМР- Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Навыками расшифровки спектров ЯМР ¹ Н органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы. | Не владеет навыками расшифровки спектров ЯМР ¹ Н органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии | Владеет навыками расшифровки спектров ЯМР ¹ Н органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии |

| | | | |
|--|--|-----------|-----------|
| | | молекулы. | молекулы. |
|--|--|-----------|-----------|

ПК-5 – готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза

| Этап (уровень) освоения компетенци и | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|--|---|--|--|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Спектроскопию ЯМР ¹³ С. Спектры ЯМР ¹³ С с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР ¹³ С без подавления по протонам, спектры ЯМР ¹³ С с частичным подавлением протонов. Спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Применение ПМР и ЯМР ¹³ С спектров для установки структуры органических соединений. | Не знает спектроскопию ЯМР ¹³ С, спектры ЯМР ¹³ С с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР ¹³ С без подавления по протонам, спектры ЯМР ¹³ С с частичным подавлением протонов, спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT, применение ПМР и ЯМР ¹³ С спектров для установки структуры органических соединений. | Знает спектроскопию ЯМР ¹³ С, спектры ЯМР ¹³ С с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР ¹³ С без подавления по протонам, спектры ЯМР ¹³ С с частичным подавлением протонов, спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT, применение ПМР и ЯМР ¹³ С спектров для установки структуры органических соединений. |
| Второй этап (уровень) | Уметь: Рассчитывать спектры ЯМР ¹³ С по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ- инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР ¹³ С, находить Х.С. углеродных атомов, | Не умеет рассчитывать спектры ЯМР ¹³ С по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ- инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные | Умеет рассчитывать спектры ЯМР ¹³ С по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ- инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР ¹³ С, |

| | | | |
|-----------------------|--|--|---|
| | устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР ¹³ C OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений. | спектры ЯМР ¹³ C, находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР ¹³ C OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений. | находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР ¹³ C OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Навыками применения ЯМР ¹³ C спектров для установки структуры органических соединений. | Не владеет навыками применения ЯМР ¹³ C спектров для установки структуры органических соединений. | Владеет навыками применения ЯМР ¹³ C спектров для установки структуры органических соединений. |

ПК-8 – готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований

| Этап (уровень) освоения компетенции | Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций) | Критерии оценивания результатов обучения | |
|-------------------------------------|--|---|---|
| | | «Не зачтено» | «Зачтено» |
| Первый этап (уровень) | Знать: Теорию масс-спектрометрии. Методы ионизации, электронный удар, фотоионизацию, химическую ионизацию. Типы ионов в масс-спектрометрии. Принципиальная схема масс-спектрометра. Разрешающую силу масс-спектрометра. | Не знает теории масс-спектрометрии, методов ионизации, электронного удара, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальную схему масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. | Демонстрирует знание теории масс-спектрометрии, методов ионизации, электронного удара, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальную схему масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. |
| Второй этап | Уметь: Использовать полученные | Не умеет использовать | Умеет использовать полученные знания по |

| | | | |
|-----------------------|--|---|--|
| (уровень) | знания по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. | полученные знания по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. | теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. |
| Третий этап (уровень) | Владеть: Навыками использования полученных знаний по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. | Не владеет навыками использования полученных знаний по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. | Владеет навыками использования полученных знаний по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. |

Критериями оценивания являются оценки, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), Шкалы оценивания:

для зачета:

зачтено,

не зачтено.

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

| Результаты обучения | | Формируемая компетенция (с указанием кода) | Оценочные средства |
|---------------------|--|---|--------------------|
| Знания | Теоретические основы спектральных методов исследования. Критерии объединения оптических методов в единый класс, теорию взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. | способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1); готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3) | Коллоквиум, зачет |
| | Теорию возникновения инфракрасных спектров, квантово-механический подход к описанию колебательных спектров. Фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Правила отбора и интенсивность в ИК-поглощении. Колебания сложных молекул. | владением знаниями в области современных теоретических концепций различных разделов материаловедения, включая методы синтеза веществ и материалов, анализа их структуры и свойств, фундаментальные навыки научно-исследовательской работы (ОПК-2) | Коллоквиум, зачет |
| | Теорию метода УФ-спектроскопия. УФ-спектроскопия в видимой и УФ-областях. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул. Симметрия и правила запрещенных переходов. Классификация и отнесение электронных переходов. | способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и | Контрольная работа |

| | | | |
|--|--|---|---------------------------------------|
| | | маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4) | |
| | Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса. | готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5) | Коллоквиум, зачет |
| | Спектроскопию ПМР. Классификацию спиновых систем (номенклатуру спиновых систем), химические сдвиги основных видов протонов органических соединений, спектры первого порядка. спектры ПМР второго порядка, АВ- спектр, АВХ- спектр, нахождение ХС и величины констант ССВ. | готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8) | Коллоквиум, зачет |
| | Спектроскопию ЯМР ¹³ С. Спектры ЯМР ¹³ С с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР ¹³ С без подавления по протонам, спектры ЯМР ¹³ С с частичным подавлением протонов. Спектры INERT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Применение ПМР и ЯМР ¹³ С спектров для установки структуры органических соединений. | | Коллоквиум, контрольная работа, зачет |

| | | | |
|--------|---|---|--------------------|
| | <p>Теорию масс-спектрометрии. Методы ионизации, электронный удар, фотоионизацию, химическую ионизацию. Типы ионов в масс-спектрометрии. Принципиальная схема масс-спектрометра. Разрешающую силу масс-спектрометра.</p> | | Контрольная работа |
| Умения | <p>Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.</p> | <p>готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5)</p> <p>готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8)</p> | Контрольная работа |
| | <p>Грамотно соотносить сигналы в ИК-спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания.</p> | <p>способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники,</p> | Контрольная работа |

| | | | |
|--|---|---|--------------------|
| | | передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4) | |
| | Применять электронные спектры поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. | владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, | Контрольная работа |
| | Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР. | включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях материаловедения и в современной технологии материалов (ОПК-3) способностью к | Контрольная работа |
| | Расшифровывать предложенные спектры ЯМР ¹ H органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из | комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного | Контрольная работа |

| | | | |
|---------------------------------------|---|---|---|
| | <p>данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.</p> <p>Рассчитывать спектры ЯМР¹³C по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ-инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹³C, находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР¹³C OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений.</p> <p>Использовать полученные знания по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра.</p> | <p>и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и</p> <p>детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4)</p> | <p>Контрольная работа</p> <p>Контрольная работа</p> |
| Владения (навыки / опыт деятельности) | <p>Навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p> | <p>владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях</p> | Контрольная работа |
| | <p>Владеть методами и приемами расшифровки ИК-спектров.</p> | | Контрольная работа |
| | <p>Навыками применения электронных спектров поглощения в</p> | | Контрольная работа |

| | | | |
|--|--|--|--------------------|
| | качественном, структурном и количественном анализах. | материаловедения и в современной технологии материалов (ОПК-3) | |
| | Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР. | готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации | Контрольная работа |
| | Навыками расшифровки спектров ЯМР ¹ H органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы. | состава и условий синтеза (ПК-5) готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному | Контрольная работа |
| | Навыками применения ЯМР ¹³ C спектров для установки структуры органических соединений. | направлению исследований (ПК-8) | Контрольная работа |
| | Навыками использования полученных знаний по теории масс-спектрометрии, методам ионизации, электронному удару, фотоионизации, химической ионизации, типов ионов в масс-спектрометрии, принципиальной схемы масс-спектрометра, разрешающей силы масс-спектрометра. | | Контрольная работа |

Критерии оценки:

- **оценка «зачтено»** 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;

- **оценка «незачтено»** 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.

Коллоквиум

В ходе коллоквиума осуществляется беседа преподавателя со студентом по вопросам пройденной темы, с целью определения знаний студента. Коллоквиум может служить формой не только проверки, но и повышения знаний студентов.

Примерные вопросы к коллоквиуму:

1. Явления, происходящие с ядрами, имеющими спин $\frac{1}{2}$ в магнитном поле H_0
2. Явление релаксации
3. Стандарты в ЯМР-спектре, виды, достоинства и недостатки каждого
4. Чем объясняется индивидуальность местоположения 1H и ^{13}C в ЯМР.
5. Константа спин-спинового взаимодействия.
6. Характеристика атомного вклада σ_a химический сдвиг.
7. Геминальные, вицинальные и дальние константы спин-спинового взаимодействия.
8. Принцип аддитивности в ЯМР ^{13}C на примере производных бензола.
9. Можно ли различить по ЯМР ацетофенон и α – фенилуксусный альдегид и по каким признакам.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он выполнил 80 - 100% задания;
- оценка «незачтено» выставляется студенту, если он выполнил 79 - 59 % задания.

Контрольная работа

Описание контрольной работы:

Средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу, состоит из небольшого количества средних по трудности вопросов, задач или заданий, требующих поиска обоснованного ответа.

Примеры вариантов контрольных работ:

Контрольная работа № 1

Вариант 1

1. Какое из двух веществ $CH_3COCH_2CH_2CH_3$ или $CH_3COCH=CHCH_2CH_3$ будет иметь в спектре полосы поглощения при 1715, 1640, 995, 915 и 3010 cm^{-1} ?
2. Какие основные изменения произойдут в ИК-спектре после протекания следующей реакции:
 $CH_2=CH-CH_2-CO-CH_3 \rightarrow CH_3-CH=CH-CO-CH_3$?
3. По ИК-спектру и элементному составу С – 80,0%; Н – 6,67%; О – 13,33% определите структуру соединения.
4. Рассчитайте максимальную концентрацию непредельного эфира, которая может быть получена по реакции олефинирования, если считать, что изменение ϵ прямо пропорционально изменению концентрации. Каково оптимальное время реакции (снач=2,6×10⁻⁵моль/л): 0,5ч ($\epsilon=4000$); 1ч ($\epsilon=16000$); 1,5ч ($\epsilon=21500$); 2,5ч($\epsilon=21800$); 3,0ч($\epsilon=21900$); 3,5ч($\epsilon=21800$), если считать, что в момент равновесия прореагировало 80% исходного вещества?
 $CH_3CHO \leftrightarrow CH_3CH=CHCOOC_2H_5$
5. Даны два соединения $CH_3CH_2CH=CHCOOCH_3$ и $CH_2=CHCH=CHCOOCH_3$. Какому из них соответствует спектр $\lambda_{max}=310$ ($\epsilon=28000$)? Ответ мотивируйте.
6. Определите строение двух соединений, если известно, что они имеют брутто-формулу $C_8H_8O_2$ и УФ-спектры, изображенные на рисунке. В ИК-спектре первого соединения имеется полоса при

1718 cm^{-1} и широкая полоса в области 3000 cm^{-1} . В ИК-спектре второго соединения имеется полоса 1720 cm^{-1} . Поглощение в области 3000 cm^{-1} отсутствует.

7. Установите структуру двух соединений одинакового брутто состава $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$, различия по строению по их ПМР – спектрам.

Контрольная работа № 2

Вариант 1

1. При обработке соединения **A** с брутто-формулой $\text{C}_{11}\text{H}_{18}\text{O}_2$ третбутилгидропероксидом в присутствии гексакарбонила молибдена после осторожной водной обработки получена смесь двух соединений **B** и **B** в соотношении, приведенном на хроматограмме (рис. 5). После обработки этой смеси подкисленным водным раствором HIO_4 и экстракции продукта реакции эфиром, выделены соединения **Г** и ацетон. Установите структуры всех соединений, если их спектральные характеристики следующие: **A**: ЯМР (δ , м. д.): ^1H 1.60 с (3H), 1.62 и 1.72 с (6H), 2.08 м (4H), 3.6 с (3H),

B: ЯМР ^1H (δ , м. д.): 1.25 с (6H), 1.60 с (3H), 1,86 м (2H), 2.1 т (2H), 3.12 т (1H), 3.62 с (3H), 5.40 с (1H)

B: ЯМР ^1H (δ , м. д.): 1.23 с (6H), 1.58 с (3H), 1.92 м (2H), 2.15 т (2H), 3.21 т (1H), 3,60 с (3H), 4,92 с (2H), 5.38 с (1H)

Спектр ПМР (δ , м. д.): 1.62 с (3H), 2.01 т (2H), 2.4 т (2H), 3.6 с (3H), 3.35 с (1H), 9.6 с (1H).

2. Установите структуру двух соединений одинакового брутто состава $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$, различия по строению по их ПМР – спектрам.

3. В спектре ПМР диметилформаида $\text{H}-\text{CO}-\text{N}(\text{CH}_3)_2$ наблюдаются два синглета от метильных групп. При повышении температуры эти два острых сигнала уширяются, сливаются, а при температуре около 165о образуют один острый пик. Чем вызваны изменения в спектре ПМР вещества? 4. Установите структуру соединения формулы $\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_2$ по его ПМР – спектру если в его пик - спектре присутствуют полосы поглощения при 1500, 1600 и 3350 cm^{-1} .

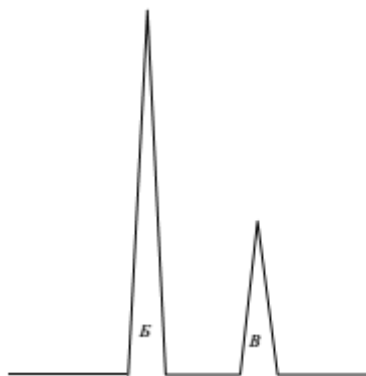


Рис. 5.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он выполнил 80 - 100% задания;
- оценка «незачтено» выставляется студенту, если он выполнил 79 - 59 % задания.

Зачет

Вопросы к зачету:

ИК-спектроскопия

1. Опишите теоретическую основу появления сигналов карбонильной группы в ИК-спектрах.
2. Принцип устройства ИК-спектрометра. Условия снятия ИК-спектра.
3. Законы поглощения света, выражения Бугера и Бугера-Ламберта-Бера.
4. Требования к веществам при снятии ИК-спектра, влияние разбавления на качество спектра и местоположение ряда характеристических частот.
5. Понятие «характеристическая полоса в ИК-спектроскопии». Чем вызвано различие в местоположении характеристических частот для ацетальдегида и ацетона?
6. Определение числа полос в ИК-спектре. Разобрать возможные валентные и деформационные колебания для формальдегида.
7. Характеристические полосы поглощения насыщенных линейных и разветвленных углеводородов. Объяснить их появление на примере бутана и изобутана.
8. Характеристические полосы непредельных соединений. Разобрать их возникновение на примере пропена и бутена-2.
9. Характеристические полосы ароматических соединений. Понятие о деформационных и валентных колебаниях толуола.
10. Понятие «характеристическая полоса» в ИК-спектре. Какие характеристические полосы должны наблюдаться в ИК-спектрах α,β -непредельных карбонильных соединений (альдегидов и кетонов)?
11. Описать, каким образом можно отличить различные типы двойных связей с помощью ИК-спектроскопии.

УФ-спектроскопия

1. Что такое запрет по симметрии на сигналы в УФ-спектре и почему, тем не менее, подобные поглощения появляются?
2. Причина возникновения УФ-спектров. Возможные электронные переходы в органических соединениях. Зависимость коэффициента экстинкции (ϵ) от разрешенности электронных переходов. Правила, определяющие условия запрещения появления поглощения в УФ-спектре (правила отбора). Почему данные полосы, тем не менее, наблюдаются в УФ-спектре?
3. Влияние сопряжения на длину волны в УФ-спектре, при которой наблюдается поглощение, и на экстинкцию. Разобрать на конкретном примере.
4. Хромофорные группы карбонильных соединений. Сравнение УФ-спектров насыщенных и ненасыщенных кетонов и альдегидов.
5. Хромофорные группы ароматических соединений. Причина сложного характера УФ-спектра бензола и его производных.
6. Хромофоры. Какие типы хромофоров наиболее характерны для УФ-спектров? Условия сдвига поглощения в видимую область.
7. Возможные переходы в предельных и непредельных карбоновых кислотах и их эфирах в УФ-спектре. Влияние сопряжения на λ и ϵ .
8. Возможные переходы в циклических соединениях и их непредельных аналогах в УФ-спектрах. Сравнение с непредельными ациклическими соединениями.
9. Какие электронные переходы могут наблюдаться в УФ-спектрах диметил-виниламина? Изменится ли УФ-спектр данного соединения при обработке его разбавленным раствором HCl?
10. Какую смысловую нагрузку несет ϵ (коэффициент поглощения) в УФ-спектре? От каких факторов зависит его величина?

ЯМР-спектроскопия

1. Условия, которым должны отвечать ядра, пригодные для ЯМР-спектроскопии. Рассчитайте химические сдвиги ^1H и ^{13}C для *m*-нитротолуола.
2. Что входит в понятие «химический сдвиг». Почему ядра одного вида резонируют при различных частотах в ЯМР-спектре?
4. Основы теории возникновения ядерного магнитного резонанса (требования к составу ядра, поведение ядер в постоянном и переменном магнитном полях).
5. Возникновение и влияние диамагнитной и парамагнитной составляющей на химический сдвиг в спектре ПМР. Привести примеры дезэкранирующего влияния этих факторов.
6. Относительные и абсолютные единицы, принятые для выражения химических сдвигов ядер в спектре ПМР и ЯМР ^{13}C . Формулы расчета δ , развертки поля по имеющимся остальным параметрам.
7. Причины возникновения мультиплетности в ЯМР – спектре. Разберите возникновение дублета, триплета и квартета. Характер спектра при наличии у соседних атомов неэквивалентных протонов.
8. Сложные спектры ПМР. АВ и АВХ-системы. Применение спектроскопии двойного ядерного магнитного резонанса для расшифровки спектров ЯМР.
9. Влияние заместителей в ароматическом кольце на химический сдвиг ароматических протонов. Расчет для анилина в спектре ЯМР ^1H и ^{13}C .
10. Основные параметры, описывающие спектры ЯМР ^1H и ^{13}C . Требования к эталонам, выбираемым за нулевые сигналы при описании ЯМР-спектров.
11. Спин-спиновое взаимодействие протонов в спектре ЯМР ^1H , двойной ядерный магнитный резонанс. Возможности метода.
12. Какими характеристиками описывается ЯМР-спектр? Дать их подробное описание и приемы расчета.
13. Протонный магнитный резонанс. Условия магнитного резонанса. Параметры спектров ПМР. Химический сдвиг (ХС), константа экранирования, измерение ХС, шкала ХС, аддитивные схемы расчета ХС. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ), геминальное взаимодействие, вицинальное взаимодействие, дальнее взаимодействие, Константы ССВ, измерение КССВ. Величина КССВ, зависимость вицинальных КСВ от диэдрального угла между взаимодействующими протонами. Уравнение Карплуса. Интегральная интенсивность. Ширина линии, её измерение. Зависимость ширины линии от времени релаксации.
14. Спектроскопия ПМР. Классификация спиновых систем (номенклатура спиновых систем). Спектры первого порядка, установление регио-изомерии, стереоизомерии. Спектры ПМР второго порядка, АВ- спектр, АВХ- спектр, нахождение ХС и величины констант ССВ.
15. Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Спектры ЯМР ^{13}C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР ^{13}C без подавления по протонам, спектры ЯМР ^{13}C с частичным подавлением протонов. Спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Спиновое эхо и J-спектроскопия (гетероядерная J-модуляция).
16. Параметры спектров ЯМР ^{13}C . Химический сдвиг ХС, измерение ХС, шкала ХС. Константы ССВ, прямые углерод-протонные константы, геминальные константы, вицинальные константы ССВ, величины констант ССВ. Зависимость углерод-протонных констант от гибридизации углеродных атомов, от электроотрицательности заместителей. Интегральная интенсивность сигналов ЯМР ^{13}C и ширина линии. Расчеты спектров ЯМР ^{13}C , аддитивные схемы расчетов ХС в спектрах ЯМР ^{13}C по инкрементам.
17. Двумерная спектроскопия ЯМР. Спектроскопия корреляции ХС. Корреляция обусловленная гомоядерным скалярным взаимодействием (COSY, TOCSY). Корреляция обусловленная гетероядерным скалярным взаимодействием (CHCORR, HMBC, HSQC). Двумерная J-

спектроскопия, гетероядерная J -спектроскопия (JRES). Примеры двумерных спектров. Эксперимент Inadequate.

Масс-спектрометрия

1. Требования к чистоте и виду образца и растворителя при снятии масс-спектра.
 2. Приемы ввода образца при снятии масс-спектра.
 3. Перегруппировочные ионы в масс-спектрометрии.
 4. Примеры стабилизации осколочных ионов при наличии гетероатома в молекуле.
 5. Разобрать возможный набор осколочных ионов в масс-спектре молекулы ABC.
 6. Устройство масс-спектрометра. Основы метода.
 7. Требования к энергии электронов и концентрации образца, его физическим константам при снятии масс-спектров.
 8. Прогнозируйте, какие пики в масс-спектре будут наблюдаться для соединения $\text{H}_2\text{CCl}-\text{CH}_2\text{COOCH}_3$?
 9. Особенности масс-спектров галогенсодержащих органических соединений.
- Возможности масс-спектрометрии. В каких случаях можно получить с помощью этого метода максимальную информацию о веществе?

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он выполнил 80 - 100% задания;
- оценка «незачтено» выставляется студенту, если он выполнил 79 - 59 % задания.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

Основная литература:

1. Кунакова Р.В., Зайнуллин Р.А., Куковинец О.С. «Применение спектроскопии в органической химии» Москва, «Химия» 2007г.
2. Васильев В.П. «Аналитическая химия», ч.2., М: Дрофа, 2007г., 383с.
3. Х.Гюнтер, Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. 480с.
4. Н. М. Сергеев. Спектроскопия ЯМР. М.: МГУ, 1981. 280с.
5. В.А. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. Сборник задач: учеб. пособие для вузов. М.: Химия, 1985. 232 с.
6. Б. И. Ионин, Б. А. Ершов, А. И. Кольцов. ЯМР-спектроскопия в органической химии. Л.: Химия, 1983. 279с.
7. Г. Леви, Г. Нельсон. Руководство по ядерному магнитному резонансу углерода-13 для химиков-органиков. М.: Мир, 1975. 295с.

Дополнительная литература:

1. Э. Бакс. Двумерный ядерный магнитный резонанс в жидкости. Новосибирск: Наука, 1989. 160с.
2. Э. Дероум. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992. 188с.
3. А. Жунке. Ядерный магнитный резонанс в органической химии. М.: Мир, 1974. 176с.
4. Л.А. Козицына, И.Б. Куплетская. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс спектроскопии в органической химии. М.: МГУ, 1979. 238с.
5. Э. Претч, Ф. Бюльманн, К. Афвольтер. Определение строения органических соединений. (таблицы спектральных данных), издательство «Мир», Москва, 2006
6. О.Сильверстейн, Ф.Вебстер, Д.Кимл. Спектрометрическая идентификация органических соединений. Москва. Бинوم. Лаборатория знаний 2012 г.)
7. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. ICSPF pres 2011/
8. Б. Блюмих. Основы ЯМР. Москва. Техносфера. 2011.
9. Спирихин Л.В., Шепилевич И.С., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Талипова Г.Р., Галин Ф.З. ЯМР-¹H спектроскопия в органической химии: Учебное пособие. Уфа: РИО БашГУ, 2004.- 140 с.

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

1. Научная электронная библиотека: <http://www.elibrari.ru>
2. Библиотека БашГУ: www.bashlib.ru
3. EMILY (Electronic Membrane Information LibrarY) — Электронная библиотека по мембранам и мембранным технологиям, БО, аннотации материалов периодических изданий, конференций, технических сообщений, книг;
4. Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics (ФАКТ) — База термодинамических свойств и программы расчета равновесного состава многокомпонентных и многофазных систем. Бесплатный доступ к каталогу чистых веществ, базе данных термодинамических свойств чистых веществ, и к модулю простейших термодинамических расчетов;
5. WWW Patent searching и Free Patents Online Database — Поиск патентов;

6. DjVu БИБЛИОТЕКИ

Перечень библиотек DjVu по направлениям: естественно-научные, технические, прочие.
Allbest.ru

Программное обеспечение:

1. Пакет офисных приложений профессионального уровня OfficeProfessionalPlus 2013 RussianOLPNLAcademicEdition № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
2. Серверная операционная система Windows Server Standard 2012 Russian OLP NL AcademicEdition 2Proc № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
3. Операционная система для персонального компьютера Win SL & Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
4. Обновление операционной системы для персонального компьютера WindowsProfessional 8 RussianUpgradeOLPNLAcademicEdition № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
5. Desktop Education ALNG LicSAPk OLVS E 1Y Academic Enterprise № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
6. Система электронного тестирования на базе Moodle <http://moodle.bashedu.ru/course/view.php?id=2841> (afferte).

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

| Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы | Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа |
|--|---|---|
| 1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) | <i>Лекции</i> | Аудитория. № 402 Учебная мебель, доска. |
| 2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) Центр коллективного пользования УФИХ УФИЦ РАН | <i>Лабораторные работы</i> | Аудитория. № 402 Учебная мебель, доска. |
| 3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) | <i>Проведение групповых и индивидуальных консультаций</i> | Аудитория. № 402 Учебная мебель, доска. |
| 4. учебная аудитория для проведения текущего контроля и | <i>Проведение текущего контроля и промежуточной</i> | Аудитория. № 402 Учебная мебель, доска. Аудитория № 403 (компьютерный |

| | | |
|--|--------------------------------------|--|
| <p>промежуточной аттестации: аудитория № 402, 403 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)</p> | <p><i>аттестации</i></p> | <p>класс) Коммутатор HP V1410-24G Персональный компьютер в комплекте Lenovo ThinkCentre All-In-One (12 шт) Персональный компьютер Моноблок барбон ECS G11-21ENS6B 21.5 G870/2GDDR31333/320G SATA/DVD+RW (12 шт) Сервер №2 Depo Storm1350Q1 Коммутатор Hewlett Packard HP V1410-8 G.</p> |
| <p>5. помещения для самостоятельной работы: библиотека, аудитория № 201 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) читальный зал №2 (физмат корпус - учебное)</p> | <p><i>Самостоятельная работа</i></p> | <p>Аудитория № 201 PentiumG2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь ПК в компл. Фермо Intel Intel PentiumG2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь читальный зал №2 (физмат корпус - учебное) PentiumG2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь -5 шт. ПК в компл. Фермо Intel. Моноблок №1 Фермо AMD A8-5500 – 5 шт. Программное обеспечение: 1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные 2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> |

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
 ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
 НАИМЕНОВАНИЕ ФИЛИАЛА
 НАИМЕНОВАНИЕ ФАКУЛЬТЕТА (ИНСТИТУТА)

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Применение спектральных методов анализа в контроле качества медицинских
 субстанций и материалов на ___ 1 ___ семестр

Очная форма обучения

| Вид работы | Объем дисциплины |
|---|------------------|
| Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов) | 108/3 |
| Учебных часов на контактную работу с преподавателем: | |
| лекций | 12 |
| практических/ семинарских | |
| лабораторных | 24 |
| других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР) | 0,2 |
| Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР) | 71,8 |
| Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль) | |

Форма(ы) контроля:
 зачет ___ 2 ___ 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. | Теоретические основы физико-химических методов исследования. Критерии объединения оптических методов в единый класс, теория взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. | 2 | | 4 | 10 | №1, с. 5-10 | Соответствующий раздел квантовой химии | Коллоквиум, контрольная работа, зачет |
| 2. | Инфракрасные спектры и их взаимосвязь со строением органических соединений Теория возникновения инфракрасных спектров, квантово-механический подход | 2 | | 4 | 12 | №1, с.11-38 №7, с. 30-56 | №1, с. 120-130 | Коллоквиум, контрольная работа, зачет |

| | | | | | | | | |
|----|---|---|--|---|----|-------------------------------------|---|--|
| | <p>к описанию колебательных спектров. Фундаментальные, обертоны и составные частоты. Правила отбора и интенсивность в ИК-поглощении. Колебания сложных молекул. Техника и методика ИК-спектроскопии и спектроскопии КР. Устройство ИК-спектрометра, требования к образцу и условия съемки. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений. Характеристические частоты различных функциональных групп.</p> | | | | | | | |
| 3. | <p>Методы электронной спектроскопии УФ-спектроскопия как</p> | 2 | | 4 | 12 | <p>№1, с. 42-52 №7, с. 7-23</p> | <p>Составить таблицу характеристических</p> | <p>Коллоквиум, контрольная работа,</p> |

| | | | | | | | |
|---|--|--|--|--|--|---|--------------|
| <p>метод исследования строения молекул, теория метода. Уф-спектроскопия в видимой и УФ-областях. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул. Симметрия и правила запрещенных переходов. Классификация и отнесение электронных переходов. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Специфика электронных спектров поглощения различных молекул. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты. Техника спектроскопии в видимой и УФ-</p> | | | | | | <p>частот и длин волн для различных классов соединений №1, с. 136-146</p> | <p>зачет</p> |
|---|--|--|--|--|--|---|--------------|

| | | | | | | | | |
|----|---|---|--|---|----|---------------------------------------|----------------|---------------------------------------|
| | областях. | | | | | | | |
| 4. | <p>Метод ядерного магнитного резонанса Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество. Основные характеристики спектров ЯМР. Абсолютные величины и относительный химический сдвиг. Влияние электронного окружения на химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса.</p> | 4 | | 4 | 12 | <p>№1, с. 53-84 №7, с. 72-88</p> | №1, с. 147-156 | Коллоквиум, контрольная работа, зачет |

| | | | | | | | | |
|----|--|---|--|---|----|--|----------------|--|
| | <p>Химические сдвиги основных видов протонов органических соединений.</p> <p>Спектроскопия ЯМР¹³C. Применение ПМР и ЯМР¹³C спектров для установки структуры органических соединений.</p> <p>Техника и методика снятия спектров ЯМР. Требования к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров.</p> | | | | | | | |
| 5. | <p>Масс-спектрометрия</p> <p>Методы ионизации, электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация. Типы ионов в масс-спектрометрии, электростатически неоднородное поле. Принципиальная схема масс-спектрометра. Фокусирующее Действие однородного</p> | 2 | | 4 | 12 | <p>№1, с. 91-120</p> <p>№7, с. 108-121</p> | №1, с. 157-165 | <p>Коллоквиум, контрольная работа, зачет</p> |

| | | | | | | | | |
|----|--|----|--|----|------|--------------------------------|---------------|--------------------|
| | поперечного магнитного поля. Электростатическая фокусировка. Разрешающая сила масс-спектрометра. Применение масс-спектрометрии. Идентификация образца. Исследования галогенидов и азотсодержащих соединений. | | | | | | | |
| б. | Решение задач на комплексное применение всех методов (ИК-, УФ-, ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия). | | | 4 | 13,8 | №4, с. 25-141 №8, с. 31-131 | №7, с. 15-185 | Контрольная работа |
| | Всего часов: | 12 | | 24 | 71,8 | | | |

