



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
органической и биоорганической химии
протокол от «21» декабря 2021 г. № 7
Зав. кафедрой  /Р.Ф. Талипов

Согласовано:
Декан
химического факультета


/Р.М.Ахметханов
«9» марта 2022 г

**УРОВЕНЬ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ПОДГОТОВКА КАДРОВ ВЫСШЕЙ КВАЛИФИКАЦИИ
ПРОГРАММА ПОДГОТОВКИ НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИХ КАДРОВ
В АСПИРАНТУРЕ**

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Физические методы установления структуры органических соединений
Вариативная часть.

Направление подготовки
04.06.01 – Химические науки
Направленность подготовки
«Органическая химия»

Квалификация

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения
очная, заочная

Уфа – 2022 г

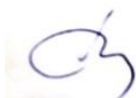
Разработчик (разработчики):



/ д.х.н., проф., зав.кафедрой органической и биологической химии
Р. Ф. Талипов



/ д.х.н., доц., профессор кафедры органической и биологической химии
Э. Р. Латыпова



/ к.х.н., доц., доцент кафедры органической и биологической химии
А. Х. Фаттахов

Рабочая программа дисциплины (модуля) утверждена на заседании кафедры органической и биологической химии, протокол от «21» декабря 2021г. № 7.

Зав. кафедрой



/Р.Ф. Талипов

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы	4
2. Цели и место дисциплины в структуре образовательной программы	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	6
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	7
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	11
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	18
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая современные профессиональные базы данных (в том числе международные реферативные базы данных научных изданий) и информационные справочные системы	19
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	19
Приложение №1, 2	22

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

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

Результаты обучения ¹		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания	Знать: - основные концепции в рамках современной органической химии и тенденции её развития; - понятийно-категориальный и терминологический аппарат современной органической химии/	ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетической органической химии	
Умения	Уметь: - применять знание методологических принципов, категорий и терминов современной органической химии	ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетической органической химии	
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть: – навыками анализа основных проблем современной органической химии, её направлений и методов - основными методологическими принципами современной органической химии -	ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетической органической химии	
Знания	Знать: - основные направления, проблемы, теории современной органической химии	ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов	

	ской химии - систему методологических принципов и методических приёмов органического синтеза	предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками	
Умения	Уметь: - применять на практике достижения отечественных и зарубежных ученых-органиков	ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками	
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть: – навыками квалифицированного, системного анализа концепций современной органической химии - навыками критического анализа и обобщения предшествующего научного опыта	ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками	
Знания	Знать: - основные методы и приёмы синтетической органической химии - новейшие методы исследований и синтеза молекул органических соединений	ПК-3 способностью использования современных методов исследования и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях	
Умения	Уметь: - оценивать альтернативные варианты построения скелета органических соединений	ПК-3 способностью использования современных методов исследования и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях	
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть: - навыками оценки различных синтетических	ПК-3 способностью использования современных методов исследо-	

	<p>подходов к молекулам органических соединений</p> <p>- навыками самостоятельного исследования различных синтетических подходов к молекулам органических соединений</p>	<p>вания и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях</p>	
--	--	--	--

2. Цели и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физические методы установления структуры органических соединений» относится к *вариативной* части.

Дисциплина изучается на 3 курсе в 6 семестре – очная форма обучения, на 3 курсе в 5, 6 семестрах – заочная форма обучения.

Целями освоения дисциплины «Физические методы установления структуры органических соединений» являются освоение теоретических основ хроматографии, масс-спектрометрии, хромато-масс-спектрометрии, двумерного ЯМР и использование этих методов для установления строения и структуры полученных органических соединений, изучения кинетики и механизма реакций, а также познание современных методов расчета теоретических спектров с использованием современных технологий и сравнение их с полученными спектрами.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин, как «Органическая химия» «Аналитическая химия», «Физическая химия», основы которых даются при обучении по программам бакалавриата, специалитета и магистратуры.

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

Содержание рабочей программы по очной форме представлено в Приложении № 1.

Содержание рабочей программы по заочной форме представлено в Приложении № 2.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

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

Код и формулировка компетенции

ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетической органической химии

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		«Неудовлетворительно» (2)	«Удовлетворительно» (3)	«Хорошо» (4)	«Отлично» (5)
Первый этап (уровень)	Знать: - основные концепции в рамках современной органической химии и тенденции её развития; - понятийно-категориальный и терминологический аппарат современной органической химии/	Отсутствие знаний	Неполные представления - об основных концепциях в рамках современной органической химии, - о понятийно-категориальном и терминологическом аппарате современной органической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы в представлении - об основных концепциях в рамках современной органической химии, - о понятийно-категориальном и терминологическом аппарате современной органической химии	Сформированные систематические представления о – об основных концепциях в рамках современной органической химии, - о понятийно-категориальном и терминологическом аппарате современной органической химии
Второй этап (уровень)	Уметь: применять знание методологических принципов, категорий и терминов со-	Отсутствие умений	В целом, успешное, но не систематическое применение методологических принципов, категорий и	В целом, успешное, но содержащее отдельные пробелы, применение методологических принципов,	Сформированное умение применять методологические принципы, категории и термины современной органической хи-

	временной органической химии		терминов современной органической химии	категорий и терминов современной органической химии	мии
Третий этап (уровень)	Владеть: навыками анализа основных проблем современной органической химии, её направлений и методов, основными методологическими принципами современной органической химии	Отсутствие навыков	В целом, успешное, но непоследовательное - владение основными методологическими принципами современной органической химии, - владение основными методологическими принципами современной органической химии	В целом, успешное, но содержащее отдельные пробелы, - применение навыков анализа основных проблем современной органической химии, её направлений и методов, - владение основными методологическими принципами современной органической химии.	Успешное и систематическое применение навыков анализа основных проблем современной лингвистики, её направлений и методов, - владение основными методологическими принципами.

Код и формулировка компетенции

ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		«Неудовлетворительно» (2)	«Удовлетворительно» (3)	«Хорошо» (4)	«Отлично» (5)

Первый этап (уровень)	Знать: - основные направления, проблемы, теории современной органической химии, - систему методологических принципов и методических приёмов органического синтеза	Отсутствие знаний	Неполные представления - об основных направлениях, проблемах, теориях современной органической химии, - о системе методологических принципов и методических приёмов органического синтеза	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления - об основных направлениях, проблемах, теориях современной органической химии, - о системе методологических принципов и методических приёмов органического синтеза.	Сформированные систематические представления – об основных направлениях, проблемах, теориях современной органической химии, - о системе методологических принципов и методических приёмов органического синтеза.
Второй этап (уровень)	Уметь: применять на практике достижения отечественных и зарубежных ученых-органиков	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое применение на практике достижений отечественных и зарубежных ученых-органиков	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы, применение на практике достижений отечественных и зарубежных ученых-органиков	Сформированное умение применять на практике достижений отечественных и зарубежных ученых-органиков
Третий этап (уровень)	Владеть: -навыками квалифицированного, системного анализа концепций современной органической химии, - навыками критического анализа и обобщения предшест-	Отсутствие навыков	В целом, успешное, но не систематическое, - применение навыков квалифицированного, системного анализа концепций современной органической химии, - владение навыками	В целом, успешное, но содержащее отдельные пробелы, - применение навыков анализа основных проблем современной органической химии, её направлений и методов, - владение	Успешное и систематическое - применение навыков анализа основных проблем современной органической химии, её направлений и методов, - владение основными методологическими принципами современной органической хи-

	вующего научного опыта.		критического обобщения предшествующего научного опыта.	основными методологическими принципами современной органической химии.	мии.
--	-------------------------	--	--	--	------

Код и формулировка компетенции

ПК-3 способностью использования современных методов исследования и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения			
		«Неудовлетворительно» (2)	«Удовлетворительно» (3)	«Хорошо» (4)	«Отлично» (5)
Первый этап (уровень)	Знать: - основные методы и приёмы синтетической органической химии, - новейшие методы исследований и синтеза молекул органических соединений	Отсутствие знаний	Неполные представления - об основных подходах органического синтеза, - о новейших методах органической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы - представления об основных аспектах органической химии, - о новейших методах органической химии.	Сформированные систематические представления - об основных аспектах органической химии, - о новейших методах органической химии
Второй этап (уровень)	Уметь: оценивать альтернативные варианты построения скелета органических	Отсутствие умений	В целом, успешное, но не систематическое умение генерировать новые идеи в ходе само-	В целом, успешное, но содержащее отдельные пробелы, умение генерировать новые идеи в ходе самостоя-	Сформированное умение генерировать новые идеи в ходе самостоятельного анализа методов органического синтеза

	соединений		стоятельно-го анализа методов органической химии	тельного анализа методов органической химии	
Третий этап (уровень)	Владеть: навыками - оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений, - самостоятельного исследования различных синтетических подходов к молекулам органических соединений	Отсутствие навыков	В целом, успешное, но не систематическое - применение навыков оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений, - владение навыками оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений	В целом, успешное, но содержащее отдельные пробелы, - применение навыков оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений, - владение навыками оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений	Успешное и систематическое - применение навыков оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений, - владение навыками оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений

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

Этапы освоения	Результаты обучения	Компетенция	Оценочные средства
1-й этап Знания	Знать: -основные концепции в рамках современной органической химии и тенденции её развития; - понятийно-категориальный и терминологический аппарат современной органической химии/	ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетиче-	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи

		ской органической химии	
2-й этап Умения	Уметь: применять знание методологических принципов, категорий и терминов современной органической химии	ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетической органической химии	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи
3-й этап Владения	Владеть: навыками анализа основных проблем современной органической химии, её направлений и методов, основными методологическими принципами современной органической химии	ПК-1 способностью к применению в ходе собственных научных исследований методологических основ, понятийно-категориального и терминологического аппарата современной общей и синтетической органической химии	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи
1-й этап Знания	Знать: - основные направления, проблемы, теории современной органической химии, - систему методологических принципов и методических приёмов органического синтеза	ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи
2-й этап Умения	Уметь: применять на практике достижения отечественных и зарубежных ученых-органиков	ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи

3-й этап Владения	Владеть: -навыками квалифицированного, системного анализа концепций современной органической химии, - навыками критического анализа и обобщения предшествующего научного опыта.	ПК-2 способностью к критическому обобщению и применению на практике результатов предшествующих научных исследований, проведённых отечественными и зарубежными химиками-органиками	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи
1-й этап Знания	Знать: - основные методы и приёмы синтетической органической химии, - новейшие методы исследований и синтеза молекул органических соединений	ПК-3 способностью использования современных методов исследования и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи
2-й этап Умения	Уметь: оценивать альтернативные варианты построения скелета органических соединений	ПК-3 способностью использования современных методов исследования и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи
3-й этап Владения	Владеть: навыками - оценки различных синтетических подходов к молекулам органических соединений, - самостоятельного исследования различных синтетических подходов к молекулам органических соединений	ПК-3 способностью использования современных методов исследования и синтеза молекул органических соединений в собственных научных исследованиях	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи

Вопросы к экзамену

1. Спектры ПМР. Химический сдвиг и его измерение.
2. Число сигналов. Эквивалентные и неэквивалентные протоны. Площадь пика и определение числа протонов.
3. Расщепление сигналов. Спин-спиновое взаимодействие. Зависимость спин-спинового взаимодействия от структуры.
4. Связь химического сдвига и КССВ со строением молекул: влияние электронной плотности на соседних атомах углерода, влияние индуцированных магнитных моментов соседних атомов и групп.
5. Эффект кольцевого тока в циклически сопряженных π -системах.
6. Химические сдвиги под влиянием водородной связи, влияние ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Эффект растворителя.
7. Эмпирические константы заместителей. Магнитная анизотропия циклопропанового кольца.
8. Геминальные и вицинальные КССВ.
9. Дальние КССВ. Спин-спиновое взаимодействие через пространство.
10. Классификация спиновых систем. Спектры I и II-го порядка. АВ- и АВХ-спектры.
11. Общие принципы анализа спектров более сложных спиновых систем.
12. Релаксационные эффекты. Продольные и поперечные релаксации.
13. Динамические эффекты в спектрах ЯМР.
14. Измерение константы скорости первого порядка методом интегрирования.
15. Внутренняя динамика органических молекул: заторможенное внутреннее вращение, инверсия конфигурации, цикла, валентная таутомерия.
16. Двойной резонанс. Применение ЯМДР для установления строения органических молекул.
17. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса парамагнитных веществ. ПСДР (шифт-реагент).
18. Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Химический сдвиг.
19. Спин-спиновое взаимодействие ^{13}C .
20. Влияние хиральности на спектры ЯМР.
21. Экспериментальный аспект спектроскопии ЯМР. Приготовление образца и ампулы. Внутренние и внешние стандарты. Влияние растворителя. Измерение спектров при различных температурах.
22. Основные методы двумерной спектроскопии ЯМР.
23. Принципы получения двумерных спектров ЯМР.
24. Двумерные спектры Н-Н COSY.
25. Двумерные эксперименты TOCSY.
26. Спектроскопия NOESY-2D, ROESY-2D.
27. Гетероядерная корреляционная спектроскопия ЯМР - HSQC, CHCORR.
28. Гетероядерная корреляционная спектроскопия HMBC.
29. Гетероядерная J-разрешенная спектроскопия.
30. Методика 2D-спектроскопии ЯМР – INADEQUATE.
31. Составные части хромато-масс-спектрометра, их функции и назначение.
32. Масс-анализаторы: магнитный, квадрупольный. Схемы, принцип работы, достоинства и недостатки.
33. Классификация интерфейсов, их устройство, принцип действия.
34. Источник ионов и способы ионизации. Ионизация ЭУ и химическая ионизация, их достоинства и недостатки.

35. Основные требования к газу-носителю, неподвижной жидкой фазе в ХМС. Характеристика современных хромато-масс-спектрометров
36. Использование ЭВМ для обработки данных масс-и хромато-масс-спектрометрии
37. Химическая ионизация органических соединений. Достоинства и недостатки. Методы повышения селективности химической ионизации.
38. Общая характеристика спектра и анализ области пика молекулярного иона
39. Химическая модификация органических соединений для хромато-масс-спектрометрического анализа
40. Групповая идентификация органических соединений с помощью гомологических серий.
41. Классификация органических соединений по спектрам ионных серий.
42. Основные представления о закономерностях фрагментации органических соединений при ЭУ. Перегруппировочные процессы.
43. Перегруппировка Мак-Лафферти в кислородсодержащих и ароматических органических соединениях
44. Логарифмические, арифметические и молекулярные индексы удерживания, использование параметров удерживания при ХМС-анализе.
45. Определение брутто-формулы органических соединений по масс-спектрам.
46. Предварительная обработка и оптимизация условий получения спектрограмм
47. Анализ следовых количеств органического вещества в ХМС. Масс-фрагментография.
48. Особенности пробоподготовки и анализа загрязнений воды и почвы.
49. Определение молекулярной массы по масс-спектру. Азотное правило.
50. Парофазный анализ. Сущность метода, область применения.
51. Схема времяпролетного масс-анализатора. Принцип работы, достоинства, применение
52. Требования к неподвижной жидкой фазе, характеристика основных видов хроматографических колонок в ХМС.
53. Основные типы ионов в хромато-масс-спектрометрии. Примеры образования главных осколочных и перегруппировочных ионов в ХМС.
54. Количественный анализ в хромато-масс-спектрометрии.
Выбор характеристических ионов для кислородсодержащих органических соединений
55. Ионный источник масс-спектрометра. Требования к ионному источнику. Основное предназначение ионного источника. Принцип его работы
56. Количественный анализ в ХМС. Типы внутренних стандартов
57. Основные реакции дериватизации органических соединений для повышения эффективности ХМС-анализа

Экзаменационный билет состоит из двух основных вопросов и одного дополнительного вопроса практического характера.

Образец экзаменационного билета:

1. Спектры ПМР. Химический сдвиг и его измерение.
2. Источник ионов и способы ионизации. Ионизация ЭУ и химическая ионизация, их достоинства и недостатки.
3. Расшифруйте спектр ПМР.

Экзамен оценивается по пятибалльной шкале.

Примерные критерии оценивания ответа на экзамене:

5 баллов (отлично) выставляется аспиранту, если он дал полный, развернутый ответ на все вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Аспирант без затруднений ответил на дополнительный вопрос.

4 балла (хорошо) выставляется аспиранту, если он ответил на все вопросы, однако допустил неточности в определении основных понятий; при ответе на дополнительный вопрос допущены небольшие неточности; дал развернутые ответы на два из трех вопроса из билета и ответил на дополнительный вопрос.

3 балла (удовлетворительно) выставляется аспиранту, если при ответе вопросы билета им допущены несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос.

2 балла (неудовлетворительно) выставляется аспиранту, если ответы на вопросы свидетельствуют о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Аспирант не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

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

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

1. Выбор оптимальных условий съемки и наиболее распространенные недостатки ИК-спектров.
2. Важнейшие характеристики полосы поглощения в области основных частот колебаний биоорганических молекул.
3. Проведение структурного анализа по ИК-спектрам.
4. Спектры комбинационного рассеяния (КР) света. Условия съемки и формы записи ИК-спектров.
5. Исследование спектров КР для структурного анализа.
6. Электронные спектры. Спектры поглощения в ультрафиолетовом и видимом областях (УФ-спектры). Условия получения и способы изображения электронных спектров.
7. Структура биоорганических молекул и электронные хромофоры и ауксохромы.
8. Краткая характеристика избирательного поглощения различных структурных элементов органических молекул.
9. Исследование электронных спектров для определения строения биоорганических молекул.
10. Спектры ПМР. Химический сдвиг и его измерение.
11. Число сигналов. Эквивалентные и неэквивалентные протоны. Площадь пика и определение числа протонов.
12. Расщепление сигналов. Спин-спиновое взаимодействие. Зависимость спин-спинового взаимодействия от структуры.
13. Связь химического сдвига и КССВ со строением молекул: влияние электронной плотности на соседних атомах углерода, влияние индуцированных магнитных моментов соседних атомов и групп.
14. Эффект кольцевого тока в циклически сопряженных π -системах.

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

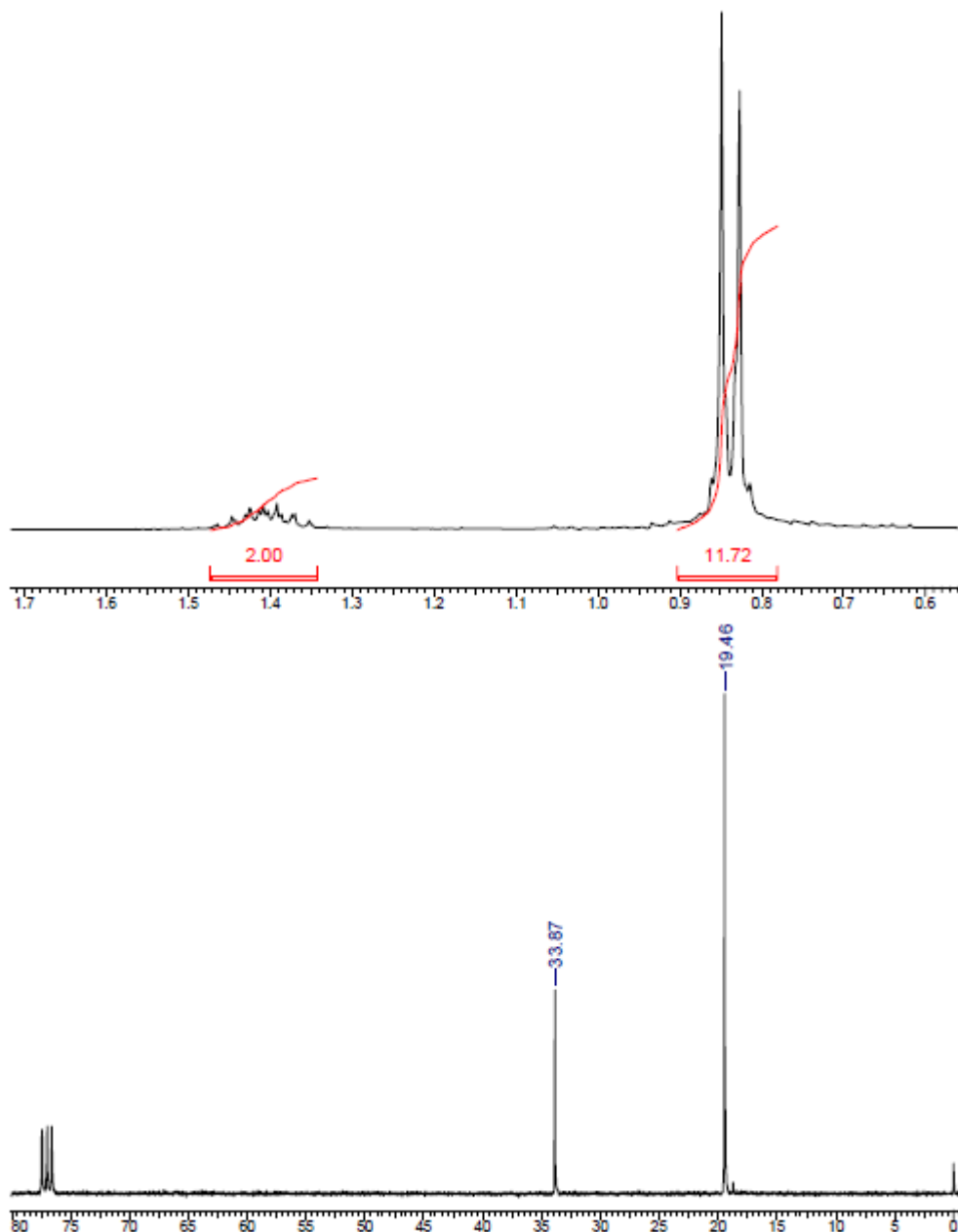
Критерии оценки (в баллах) индивидуального и группового опроса:

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;
- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе;
- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе;
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе.

Ситуационные задачи

применяются для оценки умения применять полученные задания на практике и оцениваются в рамках общей оценки индивидуального и группового опроса

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



5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

а. основная литература:

1. Л. А. Казицына, Н. Б. Куплетская. Применение УФ-, ИК-и ЯМР-и масс-спектрологии в органической химии : учеб. пособие для хим. спец. /— Изд. 2-е, перераб. и доп. — М. : МГУ, 1979. — 238 с.
2. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды [Электронный ресурс] / Москва : Техносфера, 2013. — 632 с. — <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273789>>.

б. дополнительная литература

1. Гюнтер Х. Введение в спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984.
2. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высш. шк., 1984.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая современные профессиональные базы данных (в том числе международные реферативные базы данных научных изданий) и информационные справочные системы

Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «Электронная библиотека БашГУ»: <https://elib.bashedu.ru/>
2. ЭБС «Университетская библиотека онлайн»: <http://www.biblioclub.ru/>
3. ЭБС издательства «Лань»: <http://e.lanbook.com/>

Базы данных (БД):

1. Научная электронная библиотека: <http://elibrary.ru/>
2. БД периодических изданий (на платформе EastView): <https://dlib.eastview.com/>
3. SCOPUS: <http://www.scopus.com/>
4. БД периодических изданий «ИВИС».

Информационные справочные системы:

1. «Консультант плюс»

Программное обеспечение:

1. Windows 8 Russian.Windows Professional 8 Russian Upgrade.Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
2. MicrosoftOfficeStandard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса

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

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Наименование оборудования	Программное обеспечение
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: № 008 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В).</p> <p>2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа: № 008 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В).</p> <p>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций:</p>	<p align="center">Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран преносной</p> <p align="center">Читальный зал № 1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p align="center">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>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. MicrosoftOfficeStandard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p>

<p>№ 008 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В).</p> <p>4.учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации:</p> <p>№ 008 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В).</p> <p>5. помещения для самостоятельной работы обучающихся:</p> <p>читальный зал № 1 (главный корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. А),</p> <p>читальный зал № 2 (физмат корпус - учебное, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. Б)</p> <p>лаборатория № 217 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В).</p> <p>6. помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория № 217 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В), лаборатория № 013 (химфак корпус, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, лит. В).</p>	<p>Лаборатория № 217</p> <p>Учебная мебель, генератор водорода, насос вакуумный, весы лабораторные ONAUSPA-214 С, аналого-цифровой преобразователь АЦП-2, деионизатор воды ДВ-10UV, комплекс хроматографический газовый «ХРО-МОС» ГХ-1000, компрессор, магнитная мешалка 3-х секционная с подогревом ULABUS-3110, магнитная мешалка MS-H280-Pro, автоматический поляриметр AtagoAP-300, ноутбук ASUS.</p> <p>Лаборатория № 013</p> <p>Комплект мебели ВНР, весы GR-120 (120г*0,1мг) внутр. калибровка, с поверкой, центрифуга ОПН-8, многофункциональное устройство HP LaserJet M1536 DNF MFP (CE538A)128mb, электроплитка</p>	
---	--	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины «Физические методы установления структуры органических соединений» на 6 семестре

(наименование дисциплины)

очная

форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	3/108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	2
практических	4
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	64
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/ дифференцированному зачету (Контроль)	36

Формы контроля:

Экзамен 6 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 аспирантам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	СРС			
1	2	3	5	6			
1.	<p>Двумерный ЯМР в органической химии .</p> <p>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 прави-</p>	2	-	32	[1]-[2] ОЛ, [1]-[2] ДЛ	Изучение рекомендуемой литературы	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи

<p>ла 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</p>						
--	--	--	--	--	--	--

	<p>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.</p>						
2.	<p>Хромато-масс-спектрометрические методы анализа сложных веществ.</p> <p>Основные принципы и аппаратное оформление хромато-масс-спектрометра, масс-анализаторы, интерфейсы, детекторы ионов.</p> <p>Предварительная обработка и оптимизация условий получения спектрограмм. Интерпретация масс-спектров.</p> <p>Качественные теории масс-спектрометрии. Механизмы фрагментации органических соединений. Масс-спектральные правила.</p> <p>Фрагментация органических соединений при элек-</p>	-	4	32	[1]-[2] ОЛ, [1]-[2] ДЛ	Изучение рекомендуемой литературы	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи

<p>тронно-ударной ионизации. Фрагментация углеводородов.</p> <p>Распад при действии электронного удара гетероциклических соединений</p> <p>Распад галоген- и азотсодержащих органических соединений при ЭУ ионизации.</p> <p>Фрагментация кислородсодержащих органических соединений под действием электронного удара.</p> <p>Фрагментация серосодержащих органических соединений при электронно-ударной ионизации.</p> <p>Групповая идентификация органических соединений по массовым числам молекулярных и осколочных ионов. Спектры ионных серий органических соединений.</p> <p>Хромато-масс-спектрометрическое определение следов органических соединений. ЭВМ для обработки масс-спектров. Виды поисковых, экспертных и интерпретирующих программ.</p> <p>Количественный анализ в хромато-масс-спектрометрии. Химические методы в ХМС.</p>						
--	--	--	--	--	--	--

	Всего часов:	2	4	64			
--	---------------------	---	---	----	--	--	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины ««Физические методы установления структуры органических соединений»»

(наименование дисциплины)

на 5, 6 семестр

заочная

форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	3/108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	2
практических	4
Контроль самостоятельной работы (КСР)	4
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	89
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/ дифференцированному зачету (Контроль)	9

Формы контроля:

Экзамен 6 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	СРС			
1	2	3	5	6	7	8	9
	5 семестр						
1.	<p>Двумерный ЯМР в органической химии .</p> <p>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</p>	2	2	30	[1]-[2] ОЛ, [1]-[2] ДЛ	Изучение рекомендуемой литературы	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи

	<p> 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 </p>						
--	---	--	--	--	--	--	--

	<p>ние 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.</p>							
	6 семестр						Письменный опрос, кандидатский экзамен	
2.	<p>Хромато-масс-спектрометрические методы анализа сложных веществ.</p> <p>Основные принципы и аппаратное оформление хромато-масс-спектрометра, масс-анализаторы, интерфейсы, детекторы ионов.</p> <p>Предварительная обработка и оптимизация условий получения спектрограмм. Интерпретация масс-спектров.</p> <p>Качественные теории масс-спектрометрии. Механизмы фрагментации органических соединений. Масс-спектральные правила.</p> <p>Фрагментация органических соединений при электронно-ударной ионизации.</p>	-	2	59	[1]-[2] ОЛ, [1]-[2] ДЛ	Изучение рекомендуемой литературы	Индивидуальный, групповой опрос, ситуационные задачи	

	<p>Фрагментация углеводов.</p> <p>Распад при действии электронного удара гетероциклических соединений</p> <p>Распад галоген- и азотсодержащих органических соединений при ЭУ ионизации.</p> <p>Фрагментация кислородсодержащих органических соединений под действием электронного удара.</p> <p>Фрагментация серосодержащих органических соединений при электронно-ударной ионизации.</p> <p>Групповая идентификация органических соединений по массовым числам молекулярных и осколочных ионов. Спектры ионных серий органических соединений.</p> <p>Хромато-масс-спектрометрическое определение следов органических соединений. ЭВМ для обработки масс-спектров. Виды поисковых, экспертных и интерпретирующих программ.</p> <p>Количественный анализ в хромато-масс-спектрометрии. Химические методы в ХМС.</p>						
	Всего часов:	2	4	89			