

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор

_____ Хагуров Т.А.
подпись
« 24 » _____ 2018 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Б1.В.ДВ.10.02 ЯМР-, ИК- И ХРОМАТО-МАСС-
СПЕКТРОСКОПИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Направление подготовки	04.03.01 Химия
Профиль подготовки	Органическая и биоорганическая химия
Программа подготовки	академическая
Форма обучения	очная
Квалификация выпускника	бакалавр

Краснодар 2018

Рабочая программа дисциплины «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектрометрия органических соединений» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.03.01 Химия

Программу составил:

А.В. Беспалов, канд. хим. наук



Рабочая программа утверждена на заседании кафедры органической химии и технологий протокол № 12 от «19» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Доценко В.В.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры органической химии и технологий протокол № 12 от «19» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой (выпускающей) Доценко В.В.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 5 «20» апреля 2018 г.

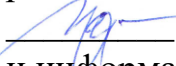
Председатель УМК факультета

Стороженко Т.П.



Рецензенты:

 Дядюченко Л.В., канд. хим. наук, зав. лаб. регуляторов роста растений ГНУ ВНИИБЗР

 Буков Н.Н., д-р хим. наук, зав. каф. общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии КубГУ

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

Цель учебной дисциплины «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектрокопия органических соединений» состоит в получении студентами теоретических знаний и практических навыков в области современных и классических методов определения состава и строения органических веществ. Особое внимание в ходе изучения дисциплины уделяется таким методам идентификации как ИК-, ЯМР- и хромато-масс-спектрометрия.

1.2 Задачи дисциплины

Задачи учебной дисциплины «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектрокопия органических соединений» состоят в получении профессиональных знаний и освоении профессиональных навыков в области структурного анализа сложных органических веществ.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектрокопия органических соединений» относится к вариативной части и является дисциплиной по выбору студента.

Освоению данной дисциплины предшествует изучение дисциплин «Неорганическая химия», «Физика». Данная дисциплина изучается параллельно с дисциплиной «Аналитическая химия» и предшествует изучению курсов «Органическая химия», «Тонкий органический синтез», «Стереохимия».

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих профессиональных компетенций (ПК):

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ПК-4	Способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	базовые и специальные методы исследования состава и строения органических соединений; границы и особенности их применения в структурном анализе	самостоятельно проводить расшифровку и анализ экспериментальных данных, полученных при помощи спектральных методов исследования	навыками применения современных и классических методов исследования строения и состава органических соединений
2.	ПК-5	Способностью получать и		обрабатывать результаты	навыками работы с

№ п.п.	Индекс компет енции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий		проведенной экспериментал ьной работы при помощи современных программных комплексов	программными комплексами, предназначенн ыми для обработки результатов экспериментал ьной работы

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач. ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры	
			3	4
Контактная работа, в том числе:				
Аудиторные занятия (всего):		110	54	56
Занятия лекционного типа		36	18	18
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия)		74	36	38
Иная контактная работа:				
Контроль самостоятельной работы (КСР)		6	2	4
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,4	0,2	0,2
Самостоятельная работа (всего), в том числе:		63,6	15,8	47,8
Оформление лабораторных работ		22	6	16
Изучение теоретического материала		20,6	2,8	17,8
Подготовка к текущему контролю		21	7	14
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен)			зачет	зачет
Общая трудоемкость	час.	180	72	108
	в том числе контактная работа	116,4	56,2	60,2
	зач. ед.	5	2	3

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины. Разделы дисциплины, изучаемые в 3 семестре.

№ разд ела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС

1	2	3	4	5	6	7
1.	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	5,8	4		0	1,8
2.	Электронная УФ спектроскопия	28	6		16	6
3.	Колебательная ИК спектроскопия	36	8		20	8
	Итого по дисциплине:		18		36	15,8

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.
Разделы дисциплины, изучаемые в 4 семестре.

№ разд ела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
4.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	38	8		16	14
5.	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса	9,8	2		0	7,8
6.	Масс-спектрометрия	32	6		12	14
7.	Хромато-масс-спектрометрия	24	2		10	12
	Итого по дисциплине:		18		38	47,8

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

3 семестр

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	Физические принципы спектральных методов исследования. Виды спектров. Связь спектральных методов с частотным диапазоном электромагнитного излучения. Дифракционные и оптические методы.	решение задач
2.	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	Особенности взаимодействия излучения с веществом. Характеристическое время различных спектроскопических методов. Применение спектральных методов для структурного анализа органических соединений.	решение задач
3.	Электронная УФ спектроскопия	Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.	ЛР1, ЛР2
4.	Электронная УФ спектроскопия	Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул.	решение задач, ЛР2

		Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп. Правила Вудворда-Физера.	
5.	Электронная УФ спектроскопия	Принцип работы УФ спектрофотометра. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.	ЛР1, ЛР2
6.	Колебательная ИК спектроскопия	Физические основы колебательной спектроскопии. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул.	ЛР3, ЛР4
7.	Колебательная ИК спектроскопия	Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений. Структурные области ИК спектра.	решение задач, ЛР4
8.	Колебательная ИК спектроскопия	Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.	решение задач, ЛР4
9.	Колебательная ИК спектроскопия	Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру.	решение задач, ЛР3

4 семестр

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
10.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Физические основы метода ядерного магнитного резонанса. Тонкая и сверхтонкая структуры сигналов ядер. Принцип работы ЯМР спектрометра.	ЛР5
11.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Анализ спектров ядерного магнитного резонанса, 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.	решение задач, ЛР5, ЛР6
12.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	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.	ЛР7

13.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	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 .	решение задач
14.	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса	Физические основы метода. Положение резонансного сигнала и g-фактор. Тонкая и сверхтонкая структура спектров ЭПР. Применение спектроскопии ЭПР для структурных исследований.	решение задач
15.	Масс-спектрометрия	Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, образование масс-спектра, типы регистрируемых ионов. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру.	ЛР8
16.	Масс-спектрометрия	Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила.	ЛР8
17.	Масс-спектрометрия	Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.	решение задач, ЛР8
18.	Хромато-масс-спектрометрия	Особенности метода хромато-масс-спектрометрии. Сочетание газового хроматографа с масс-спектрометрическим детектором. Установление количества соединения в образце по площади хроматографического пика.	ЛР9

2.3.2 Занятия семинарского типа

Семинары не предусмотрены учебным планом

2.3.3 Лабораторные занятия

3 семестр

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Электронная УФ спектроскопия	Регистрация УФ спектров органических красителей и комплексных соединений переходных металлов с органическими лигандами.	ЛР1

2.	Электронная УФ спектроскопия	Определение наличия сопряженных фрагментов в структуре органических соединений по УФ спектрам.	решение задач
3.	Электронная УФ спектроскопия	Исследование влияния растворителя на величину и интенсивность максимума полосы поглощения.	ЛР2
4.	Электронная УФ спектроскопия	Расчет максимума полосы поглощения с использованием правил Вудворда-Физера.	решение задач
5.	Колебательная ИК спектроскопия	Пробоподготовка и регистрация ИК спектров.	ЛР3
6.	Колебательная ИК спектроскопия	Пробоподготовка и регистрация ИК спектров.	ЛР3
7.	Колебательная ИК спектроскопия	Определение наличия функциональных групп в структуре органических соединений по ИК спектрам.	ЛР4
8.	Колебательная ИК спектроскопия	Определение наличия функциональных групп в структуре органических соединений по ИК спектрам.	ЛР4
9.	Колебательная ИК спектроскопия	Определение структуры органических веществ по данным УФ и ИК спектрометрии. Решение задач.	решение задач

4 семестр

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
10.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Расчет химических сдвигов по инкрементам. Снятие и расшифровка ПМР спектров первого порядка.	ЛР5
11.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Расшифровка спектров ПМР высшего порядка.	ЛР6
12.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Совместное использование спектров ПМР и ЯМР ^{13}C для идентификации органических соединений.	ЛР7
13.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Использование компьютерных программ, моделирующих ЯМР спектры.	ЛР7
14.	Масс-спектрометрия	Установление брутто-формулы соединения, исходя из интенсивностей пиков изотопных ионов.	ЛР8
15.	Масс-спектрометрия	Установление по масс-спектру структурной формулы соединения. Фрагментация органических соединений.	ЛР8
16.	Хромато-масс-спектрометрия	Анализ нефтепродуктов методом хромато-масс-спектрометрии.	ЛР9

17.	-//-	Определение структуры соединения по данным элементного анализа, масс-спектрам, ИК спектрам и спектрам ЯМР (экспериментальные задачи).	решение задач
18.	-//-	Решение структурных задач повышенной сложности.	решение задач

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовая работа не предусмотрена учебным планом

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1.	Изучение теоретического материала	1 Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений [Текст] = Spectrometric identification of organic compounds: [учебное пособие] / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с. 2 Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии [Текст]: учебное пособие для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - М.: Мир. БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с.
2.	Оформление лабораторных работ	1 Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений [Текст] = Spectrometric identification of organic compounds: [учебное пособие] / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с. 2 Физические методы исследования: колебательная спектроскопия [Текст]: учебное пособие / Н. Н. Буков, Ф. А. Колоколов, Т. В. Костырина, С. Л. Кузнецова; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар: [Кубанский государственный университет], 2010. - 53 с. 3 Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина, С.И. Карпов; под ред. Селеменева В.Ф., Семенова В.Н. - Электрон. дан. – СПб: Лань, 2014. - 416 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168 . - Загл. с экрана.
4.	Подготовка к текущему контролю	1 Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений [Текст] = Spectrometric identification of organic compounds: [учебное пособие] / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с. 2 Васильева, В.И. Спектральные методы анализа.

		Практическое руководство [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина, С.И. Карпов; под ред. Селеменева В.Ф., Семенова В.Н. - Электрон. дан. – СПб: Лань, 2014. - 416 с. - Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/50168. - Загл. с экрана. 3 Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. - 89 с.
--	--	---

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

3. Образовательные технологии

Преподавание дисциплины «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектрометрия органических соединений» предполагает следующие формы занятий в рамках традиционных образовательных технологий:

1. Информационная лекция.
2. Лабораторная работа.
3. Практическая работа (решение задач с коллективным обсуждением, индивидуальное выполнение студентами тестовых заданий).

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

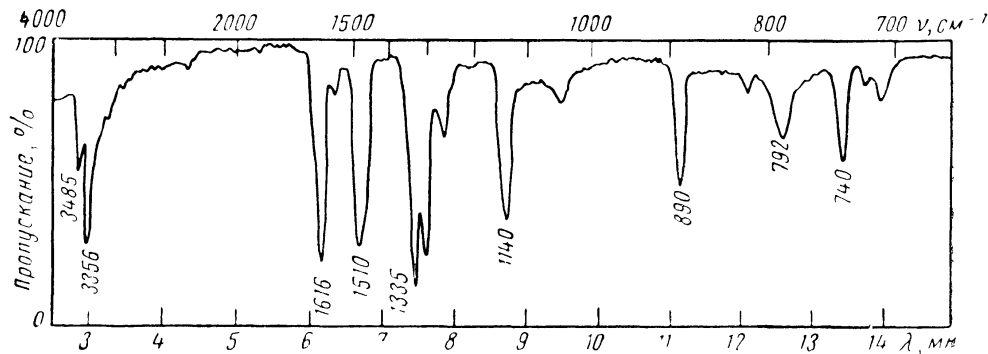
Вид занятий	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
Лекции	Проблемная лекция, лекция-диалог	8
Лабораторные работы	Работа в малых группах	32
Итого		40

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

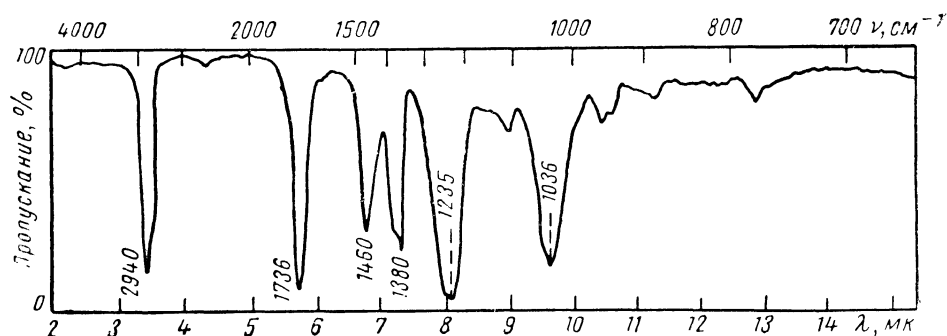
1 Примеры задач для коллективного решения в аудитории

1. Соединение с брутто-формулой $C_6H_4Cl_2N_2O_2$ имеет спектр, приведенный на рисунке (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.



2. Углеводород C_6H_{12} имеет в ИК-спектре полосы поглощения при 3045 и 1650 cm^{-1} . При озоноллизе образуются альдегид и кетон с одинаковым числом атомов углерода в молекуле. Написать структурную формулу углеводорода C_6H_{12} , а также уравнения реакций озоноллиза.

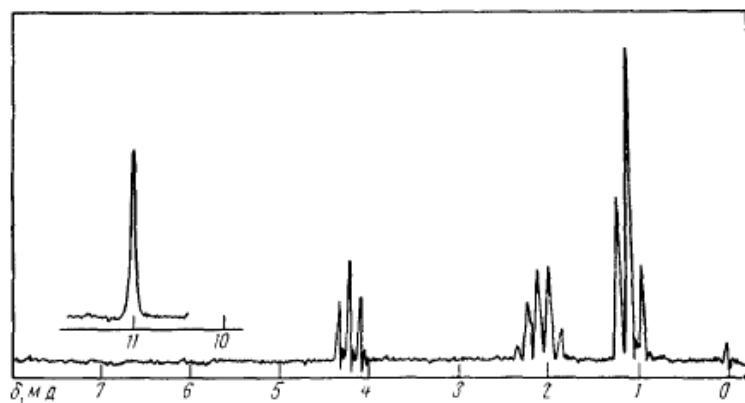
3. В какие функциональные группы входят атомы кислорода в соединении с брутто-формулой $C_8H_{16}O_2$ (спектр жидкой пленки)?



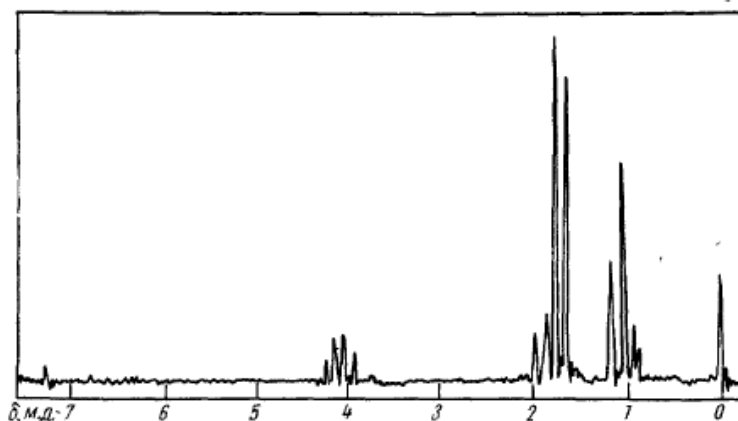
4. В спектре о-нитротолуола имеются полосы поглощения при 2960, 2870, 1520, 1465, 1380, 1330, 850 и 750 cm^{-1} . После проведения реакции в спектре исчезают полосы при 1520, 1330, 850 и 750 cm^{-1} и появляются новые полосы при 3420, 3340, 1644 cm^{-1} и широкая полоса при 680 cm^{-1} . Какая реакция была проведена и с помощью каких реагентов ее можно осуществить?

В результате другой реакции в спектре исчезают полосы при 2960, 2870, 1465, 1380 cm^{-1} и появляется широкая полоса в области 2700-2600 cm^{-1} , а также интенсивная полоса при 1680 cm^{-1} . Какая реакция проведена в данном случае и с помощью каких реагентов?

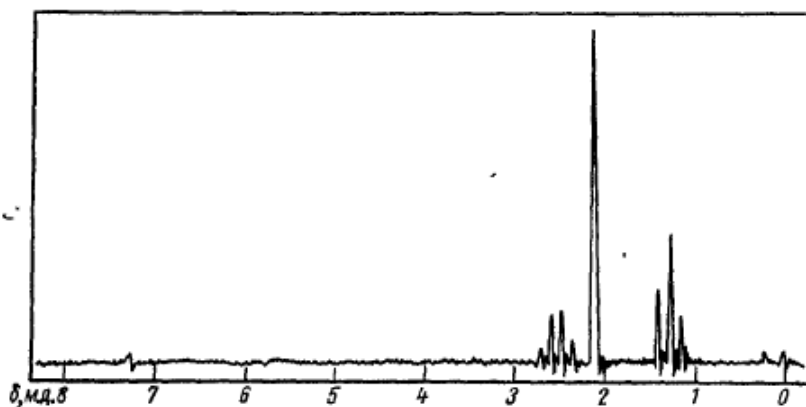
5. На рисунке приведен ПМР спектр одного из изомеров кислоты $C_3H_8BrCOOH$. Какой это изомер?



6. Какому из изомеров бромистого бутила принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



7. Какое строение имеет соединение с брутто-формулой C_3H_8S , ПМР спектр которого приведен на рисунке?



8. При гидролизе кетала $C_{10}H_{16}O_4$ (содержащего в спектре ПМР два сигнала) в кислой среде образуется кетон $C_6H_8O_2$ (синглет при 2,4 м.д.) и спирт $C_2H_6O_2$ (два синглета при 3,65 и 4,65 м.д., причем последний соответствует HDO, образующегося в результате дейтерообмена гидроксильной группы спирта в растворе D_2O). Напишите уравнение реакции.

9. В спектре аквакомплекса $V(H_2O)_6^{3+}$ при 565 нм наблюдается полоса $d \rightarrow d$ перехода. Рассчитайте энергию расщепления d -орбиталей иона V^{3+} в октаэдрическом поле лигандов: а) в Дж и эВ; б) в Дж·моль⁻¹ и кал·моль⁻¹.

10. По официальному определению 11 Генеральной конференции по мерам и весам 1 метр равен 1650763,73 длин волн излучения, соответствующего переходу между уровнями $2p_{10}$ и $5d_5$ изотопа $^{86}Kг$ в вакууме. Рассчитайте для этого перехода: а) λ (Å, нм, мкм); б) ν (Гц); в) $\underline{\nu}$ (см⁻¹).

2 Примеры контрольных вопросов и заданий к лабораторным работам

1. Какой интервал длин волн отвечает оптическому диапазону?
2. Объясните происхождение спектров испускания (эмиссионных) и поглощения (абсорбционных) атомов и молекул с позиций квантовой теории.
3. Дайте объяснения следующим терминам: стационарные состояния, энергетические уровни, основное (нормальное) состояние, возбужденное состояние, поглощение, испускание, фотон, длина волны, частота, волновое число, спектральная линия, интенсивность спектральной линии, заселенность энергетических уровней, спектр поглощения, спектр испускания.
4. Какие типы переходов в молекуле вызываются поглощением а) ультрафиолетового; б) видимого; в) инфракрасного излучения?
5. Изобразите схематически расположение энергетических уровней, соответствующих σ -, π - и n -молекулярным орбиталям, и укажите возможные типы электронных переходов между ними.
6. Почему спектр поглощения имеет вид полос, а не отдельных линий?
7. Чем характеризуется высота и форма максимума в спектре поглощения? От каких факторов зависят эти величины?
8. Какое влияние оказывает растворитель на электронный спектр молекулы? Что называют bathochromным и hypsochromным сдвигом?
9. Назовите основные типы молекулярных колебаний.
10. В каком спектральном интервале в качестве источника света используют лампы накаливания, водородную лампу, штифт Нернста, силитовый глобар, ртутную лампу?
11. Для каких областей спектра предназначены приборы, оптические детали которых выполнены из: а) стекла; б) кварца; в) поваренной соли; г) флюорита?

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

1 Список вопросов для подготовки к зачету (3 семестр)

1. Физические принципы спектральных методов исследования. Виды спектров.
2. Связь спектральных методов с частотным диапазоном электромагнитного излучения. Дифракционные и оптические методы.
3. Особенности взаимодействия излучения с веществом. Характеристическое время различных спектроскопических методов.
4. Применение спектральных методов для структурного анализа органических соединений.
5. Физические основы метода УФ-спектроскопии: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.
6. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул.

7. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп. Правила Вудворда-Физера.
8. Принцип работы УФ спектрофотометра. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.
9. Физические основы колебательной спектроскопии. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул.
10. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений.
11. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения в ИК спектрах.
12. Последовательность проведения структурного анализа колебательных спектров. Количественная ИК спектроскопия.
13. Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру.

Список вопросов для подготовки к зачету (4 семестр)

1. Физические основы метода ядерного магнитного резонанса. Тонкая и сверхтонкая структуры сигналов ядер.
2. Принцип работы ЯМР спектрометра.
3. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса, приемы упрощения сложных спектров.
4. 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.
5. 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.
6. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы).
7. Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C .
8. Физические основы метода ЭПР. Положение резонансного сигнала и g -фактор. Тонкая и сверхтонкая структура спектров ЭПР.
9. Применение спектроскопии ЭПР для структурных исследований.
10. Физические основы метода масс-спектрологии: принцип работы масс-спектрометра, образование масс-спектра, типы регистрируемых ионов.
11. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру.
12. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации.
13. Масс-спектрометрические правила. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре.
14. Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.
15. Особенности метода хромато-масс-спектрометрии. Сочетание газового хроматографа с масс-спектрометрическим детектором. Установление количества соединения в образце по площади хроматографического пика.

Критерии оценки	Оценка	Уровень
Студент успешно освоил все разделы изучаемой дисциплины, самостоятельно выполнил, оформил и защитил лабораторные работы, сформировал систему знаний и умений в области спектральных методов идентификации органических соединений, в которой могут присутствовать ошибки и допущения, не имеющие принципиального характера.	«зачтено»	базовый уровень
Студент плохо владеет теоретическим материалом, не способен самостоятельно выполнить, оформить или защитить лабораторные работы, система знаний в области спектральных методов идентификации органических соединений содержит большое число ошибок, либо вовсе не сформирована.	«не зачтено»	менее 50%, уровень не сформирован

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

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

5.1 Основная литература:

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья имеются издания в электронном виде в электронно-библиотечных системах «Лань» и «Юрайт».

1 Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений [Текст] = Spectrometric identification of organic compounds: [учебное пособие] / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 557 с.

5.2 Дополнительная литература:

1 Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина, С.И. Карпов; под ред. Селеменева В.Ф., Семенова В.Н. - Электрон. дан. – СПб: Лань, 2014. - 416 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/50168>. - Загл. с экрана.

2 Пентин, Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии [Текст]: учебное пособие для студентов вузов / Ю. А. Пентин, Г. М. Курамшина. - М.: Мир. БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 398 с.

3 Физические методы исследования: колебательная спектроскопия [Текст]: учебное пособие / Н. Н. Буков, Ф. А. Колоколов, Т. В. Костырина, С. Л. Кузнецова; М-во образования и науки Рос. Федерации, Кубанский гос. ун-т. - Краснодар: [Кубанский государственный университет], 2010. - 53 с.

5.3. Периодические издания:

1 Оптика и спектроскопия – российский научный журнал, в котором публикуются оригинальные и обзорные статьи из различных областей современной оптики и спектроскопии в диапазоне от радиоволн до рентгеновских лучей. Тематика журнала охватывает проблемы теоретической и экспериментальной спектроскопии атомов, молекул и конденсированного состояния, физики и техники лазеров, взаимодействия лазерного излучения с веществом, нанооптики, оптики фемтосекундных и предельно коротких оптических импульсов, нелинейной и квантовой оптики, физической и геометрической оптики, голографии и физических принципов построения оптических приборов, волоконной оптики, фотоники и оптоинформационных технологий, математического моделирования оптических явлений.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Информационный сайт о химии, содержащий базу знаний, справочники и химические онлайн-сервисы (<http://www.xumuk.ru>).

2. Сайт, содержащий статьи соросовского образовательного журнала (<http://www.pereplet.ru/cgi/soros/readdb.cgi>).

3. База данных издательства Springer (<http://link.springer.com>).

4. База данных рефератов и цитирования Scopus (<http://www.scopus.com>).

5. База данных рефератов и цитирования Web of Science (WoS) (<http://apps.webofknowledge.com>).

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Успешное изучение дисциплины «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектроскопия органических соединений» требует от студентов регулярного посещения лекций, а также активной работы на практических занятиях, выполнения тестовых проверочных работ, выполнения и защиты лабораторных работ, ознакомления с основной и дополнительной рекомендуемой литературой.

При подготовке к лекционному занятию студентам рекомендуется:

1) просмотреть записи предыдущей лекции и восстановить в памяти ранее изученный материал;

2) бегло просмотреть материал предстоящей лекции, с целью лучшего усвоения нового материала;

3) самостоятельно проработать отдельные фрагменты темы прошлой лекции, если это необходимо.

При конспектировании лекционного материала студентам нужно стремиться кратко, схематично, последовательно и логично фиксировать основные положения,

выводы, обобщения и формулировки, не пытаясь записать весь преподаваемый материал слово в слово.

При подготовке к лабораторному занятию рекомендуется:

1) внимательно изучить материал предстоящей работы и составить план ее выполнения;

2) уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними);

Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и последовательно, отражая все ее основные этапы в лабораторном журнале. Для успешной защиты лабораторной работы необходимо тщательно изучить лекционный и, если это необходимо, дополнительный теоретический материал по теме работы, а также правильно заполнить лабораторный журнал, сделав все необходимые расчеты и сформулировав выводы по проделанной работе.

При подготовке к практическому занятию рекомендуется:

1) ознакомиться с темой и планом занятия, чтобы выяснить круг вопросов, которые будут обсуждаться на занятии;

2) поработать с конспектом лекции по теме занятия, а также ознакомиться с рекомендуемой литературой и (при необходимости) дополнительными источниками информации в виде периодических изданий и Интернет-ресурсов.

При выполнении практической работы студентам необходимо отмечать те вопросы и разделы, которые вызывают у них затруднения, с целью последующей консультации у преподавателя. Каждый студент должен стремиться активно работать на практических занятиях и успешно выполнять тестовые проверочные работы.

Самостоятельная работа наряду с аудиторной представляет одну из важнейших форм учебного процесса. Самостоятельная работа — это планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа предназначена не только для овладения представленной дисциплиной, но и для формирования навыков работы вообще, в учебной, научной, профессиональной деятельности, способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать возникающие проблемы, находить правильные решения и т.д.

№	Вид СРС	Организация деятельности студента Форма контроля
1	2	3
1.	Оформление лабораторных работ	Проведение необходимых расчетов, аккуратное оформление хода и результатов выполненной работы в лабораторном журнале. Форма контроля – защита лабораторных работ.
2.	Изучение теоретического материала	Работа с конспектом лекций, а также с рекомендуемой основной и дополнительной литературой по заданной теме, ознакомление с периодическими изданиями и ресурсами сети Интернет. Форма контроля – защита лабораторных работ, решение задач.
3.	Подготовка к текущему контролю	Изучение теоретического материала, необходимого для успешной защиты лабораторных работ, решения задач и других видов текущего контроля. Форма контроля – все виды текущего контроля.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю)

8.1 Перечень информационных технологий

1. Использование электронных презентаций при проведении лекционных занятий, а также при защите студентами лабораторных работ.
2. Проверка отчетов по лабораторным работам и консультирование посредством электронной почты.

8.2 Перечень необходимого программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows.
2. Программный пакет для работы с различными типами документов Microsoft Office Professional Plus.

8.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Научная электронная библиотека (<http://www.elibrary.ru>).
2. Электронная библиотечная система издательства «Лань» (<http://e.lanbook.com>).
3. Электронная библиотечная система «Юрайт» (<http://www.biblio-online.ru>).
4. Научная электронная библиотека «КиберЛенинка» (<http://cyberleninka.ru>).
5. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека ONLINE» (www.biblioclub.ru).

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Для проведения занятий по дисциплине «ЯМР-, ИК- и хромато-масс-спектрометрия органических соединений», предусмотренной учебным планом подготовки бакалавров, имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины и оснащенность
1.	Лекционные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
2.	Семинарские занятия	Семинары не предусмотрены учебным планом.
3.	Лабораторные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лабораторного типа – ауд. 410с, ул. Ставропольская, 149

		(учебная лаборатория, укомплектованная специализированной мебелью, вытяжной системой вентиляции, меловой доской, средствами пожарной безопасности и оказания первой медицинской помощи, лабораторным оборудованием: рефрактометр ИРФ-454Б2М, рефрактометр УРЛ-1, весы лабораторные электронные A&D ЕК-410i, магнитные мешалки ИКА HS 7 – 6 шт., электроплитки – 8 шт., сушильный шкаф, наборы химической посуды и реактивов).
4.	Курсовое проектирование	Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.
5.	Групповые (индивидуальные) консультации	Аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
6.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
7.	Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы – ауд. 401с, ул. Ставропольская, 149 (компьютерная техника с подключением к сети «Интернет», программой экранного увеличения и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета).