

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет химии и высоких технологий
Кафедра органической химии и технологий

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной работе
и инновациям, проф.
М.Г. Барышев
2017 г.



Рабочая учебная программа по дисциплине

**Б1.В.ОД.3 СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
СТРУКТУРЫ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ**

Направление подготовки
04.06.01 Химические науки

Профиль подготовки
02.00.03 Органическая химия

Квалификация выпускника:
Преподаватель. Исследователь-преподаватель.

Форма обучения
очная

Краснодар 2017

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ОД.3 «Современные методы исследования структуры органических веществ» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования, утвержденным приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 № 869 по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) и учебным планом основной образовательной программы по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, профиль 02.00.03 Органическая химия.

Программу составил:
заведующий кафедрой органической
химии и технологий, д-р хим. наук


В. В. Доценко

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры органической химии и технологий «07» июня 2017 г. протокол № 17

Заведующий кафедрой органической
химии и технологий, д-р хим. наук


В. В. Доценко

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий протокол № 5 «27» июня 2017 г.

Председатель УМК факультета
канд. хим. наук, доцент


Т. П. Стороженко

Зав. отделом аспирантуры
д-р физ.-мат. наук, доцент


Е.В. Строганова

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель дисциплины

Целью освоения дисциплины «Современные методы исследования структуры органических веществ» является формирование у аспирантов знаний и умений в области современных и классических методов определения состава и строения органических веществ. Особое внимание в ходе изучения дисциплины уделяется таким методам идентификации как тонкослойная хроматография, УФ-, ИК-, ЯМР- и хромато-масс-спектрометрия.

1.2 Задачи дисциплины

Задачи учебной дисциплины «Современные методы исследования структуры органических веществ» состоят в освоении профессиональных знаний и получении профессиональных навыков в области структурного анализа сложных органических веществ.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Современные методы исследования структуры органических веществ» относится к вариативной части Блока 1 дисциплин подготовки аспирантов и является обязательной дисциплиной.

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 общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных компетенций (ПК)

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ОПК-1	способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	Теоретические основы современных методов исследования в органической химии	самостоятельно выбирать, осваивать и применять современные методы исследования сообразно поставленной задаче с учетом их точности, чувствительности, стоимости и доступности	навыками планирования, постановки и выполнения экспериментов для синтеза и изучения органических веществ
2.	ПК-2	Готовностью к научно-исследовательской деятельности и получению научных результатов,	требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в	представлять научные результаты по теме диссертационной работы	методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		удовлетворяющих требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности «Органическая химия»	рецензируемых научных изданиях	в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях	данных, формулировки выводов и рекомендаций по профилю 02.00.03 Органическая химия

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зач. ед. (108 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы	Всего часов	Курсы
		4
Аудиторные занятия (всего)	54	54
В том числе:		
Занятия лекционного типа	18	18
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия)	36	36
Контролируемая самостоятельная работа		
Самостоятельная работа (всего)	54	54
В том числе:		
Оформление лабораторных работ и подготовка к их защите	12	12
Изучение теоретического материала	30	30
Решение задач	12	12
Контроль		
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен)		зачет
Общая трудоемкость	час	108
	зач. ед.	3

2.2 Структура дисциплины:

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины. Разделы дисциплины, изучаемые на 4-ом курсе

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов		
		Всего	Аудиторная работа	Самостоятельная работа

			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Химическая идентификация органических веществ	14	2	2	6	4
2.	Газовая хроматография	10	2	2		6
3.	Жидкостная хроматография	18	4		6	8
4.	Масс-спектрометрия	12	2	2		8
5.	Электронная УФ спектроскопия	12	2	2		8
6.	Колебательная ИК спектроскопия	18	2	2	6	8
7.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	24	4	8		12
	<i>Итого по дисциплине:</i>	108	18	18	18	54

2.3 Содержание разделов дисциплины:

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Химические методы идентификации органических соединений	Определение функциональных групп в органических соединениях, качественный и количественный органический анализ. Химические способы определения гидроксильной и карбонильной группы. Определение карбоновых кислот и их производных. Методы химической идентификации ненасыщенных углерод-углеродных связей. Определение активных атомов водорода. Химическая идентификация функциональных групп с атомом азота. Анализ серосодержащих соединений.	устный опрос, защита лабораторной работы № 1
2.	Газовая хроматография	Общая характеристика метода газовой хроматографии. Устройство газового хроматографа. Виды детекторов в газовой хроматографии. Качественный и количественный газохроматографический анализ. Сочетание хроматографии и спектроскопии. Хромато-масс-спектрометрия.	устный опрос, практическая работа №1
3.	Жидкостная хроматография	Общая характеристика метода жидкостной хроматографии. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Аппаратура для ВЭЖХ. Распределительная хроматография. Имобилизованные жидкости. Элюотропный ряд растворителей. Жидкостная адсорбционная хроматография. Ионная	устный опрос

		хроматография и ее типы. Основные принципы гель-хроматографии.	
4.	Жидкостная хроматография	Тонкослойная хроматография. Техника проведения анализа методом ТСХ. Подбор элюентов. Применение тонкослойной хроматографии для идентификации различных классов органических веществ. Сверхкритическая флюидная хроматография. Аппаратура для СФХ. Капиллярный электрофорез.	защита лабораторной работы № 2
5.	Масс-спектрометрия	Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, образование масс-спектра, типы регистрируемых ионов. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила. 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.	практическая работа №2, устный опрос
6.	Электронная УФ спектроскопия	Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп, правила Вудворда-Физера. Принцип работы УФ спектрофотометра. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.	устный опрос
7.	Колебательная ИК спектроскопия	Физические основы. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа.	защита лабораторной работы № 3

		Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру.	
8.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Физические основы метода. Тонкая и сверхтонкая структуры сигналов ядер. Принцип работы ЯМР спектрометра. 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.	устный опрос
9.	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. 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 .	практическая работа №3

2.3.2 Занятия семинарского типа

№	Наименование раздела	Наименование практических работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Химические методы идентификации органических соединений	Семинар по теме «Химический анализ функциональных групп».	устный опрос
2.	Газовая хроматография	Практическая работа по теме «Качественный и количественный анализ жидкой смеси углеводородов методом газовой хроматографии».	практическая работа №1
3.	Масс-спектрометрия	Практическая работа по теме «Установление по масс-спектру структурной формулы соединения».	практическая работа №2

4.	Электронная УФ спектроскопия	Расчет максимума полосы поглощения с использованием правил Вудворда-Физера. Определение наличия сопряженных фрагментов в структуре органических соединений по УФ спектрам. Решение задач.	решение задач
5.	Колебательная ИК спектроскопия	Компьютерное квантово-химическое моделирование ИК спектров органических соединений.	устный опрос
6.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Расчет химических сдвигов по инкрементам. Расшифровка ПМР спектров первого порядка. Совместное использование спектров ПМР и ЯМР ¹³ C для идентификации органических соединений. Решение задач.	решение задач
7.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Использование компьютерных программ, моделирующих ЯМР спектры.	устный опрос
8.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Практическая работа по теме: «Определение структуры соединения по данным элементного анализа, масс-спектрам, ИК спектрам и спектрам ЯМР (экспериментальные задания)».	практическая работа №3
9.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Решение структурных задач повышенной сложности. Контрольная проверочная работа.	решение задач

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Химические методы идентификации органических соединений	Химическая идентификация органических веществ.	защита лабораторной работы № 1
2.	Жидкостная хроматография	Обнаружение биологически активных веществ методом тонкослойной хроматографии	защита лабораторной работы № 2
3.	Колебательная ИК спектроскопия	Пробоподготовка и регистрация ИК спектров. Определение наличия функциональных групп в структуре органических соединений по ИК спектрам.	защита лабораторной работы № 3

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовой проект не предусмотрен 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.	Оформление лабораторных работ и подготовка к их защите	<p>1. 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.</p> <p>2. Сычев, С. Н. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем [Электронный ресурс]: учебное пособие / С. Н. Сычев, В. А. Гаврилина. - СПб.: Лань, 2013. - 256 с. - https://e.lanbook.com/book/5108#authors.</p>
2.	Изучение теоретического материала	<p>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.</p> <p>2. Беккер, Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс] / Ю. Беккер; пер. Л. Н. Казанцева. - М.: Техносфера, 2009. - 528 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=88994&sr=.</p> <p>3. Беккер, Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза [Электронный ресурс] / Ю. Беккер; пер. В. С. Курова. - М.: Техносфера, 2009. - 472 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89008.</p>
3.	Решение задач	<p>1. 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.</p> <p>2. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст]. Ч. 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынюк. – М.: Техносфера, 2016. - 285 с.</p> <p>3. 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.</p>

3. Образовательные технологии

Преподавание дисциплины «Современные методы исследования структуры органических веществ» предполагает использование следующих образовательных технологий:

1. Лекционные занятия:
 - а) традиционная лекция
 - б) лекция-консультация

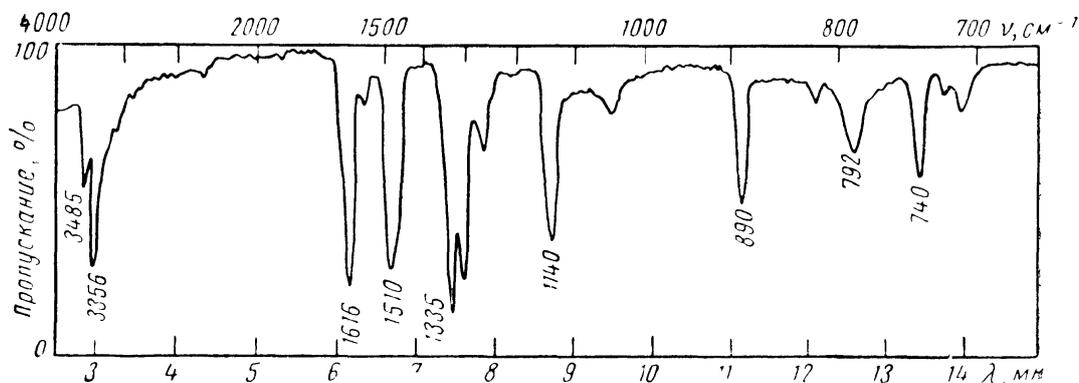
2. Практические занятия:
 - а) семинар

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

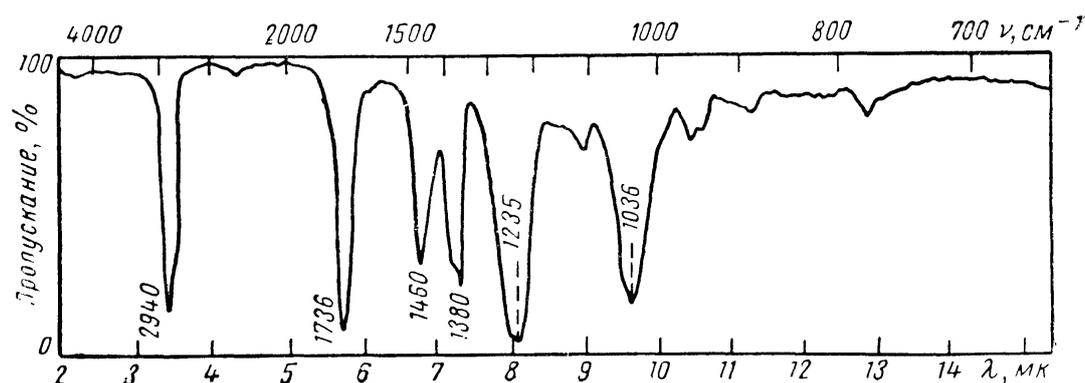
4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

1 Примеры задач для самостоятельного решения

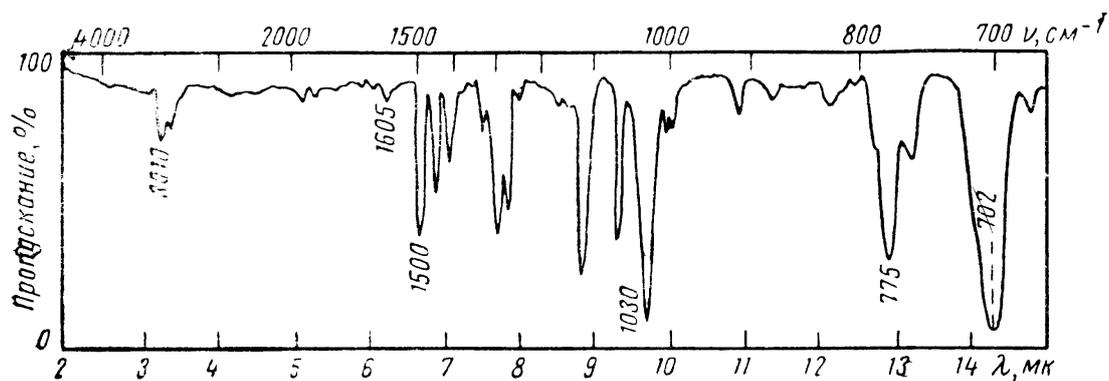
Задание 1. Соединение с брутто-формулой $C_6H_4Cl_2N_2O_2$ имеет спектр, приведенный на рисунке (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.



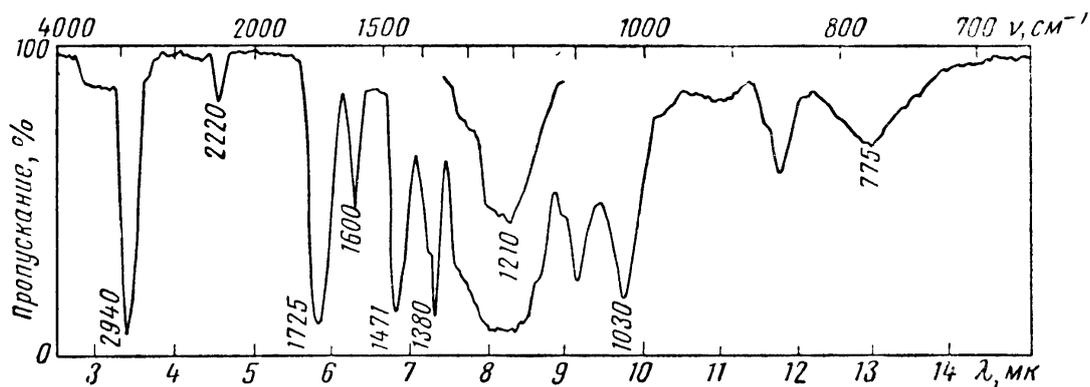
Задание 2. В какие функциональные группы входят атомы кислорода в соединении с брутто-формулой $C_8H_{16}O_2$ (спектр жидкой пленки)?



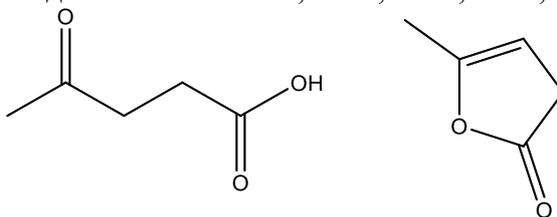
Задание 3. Проведите сопоставление полос поглощения в ИК спектре, приведенном на рисунке (в пластинке KBr), со структурой соединения $(C_6H_5CH_2)_2SO$.



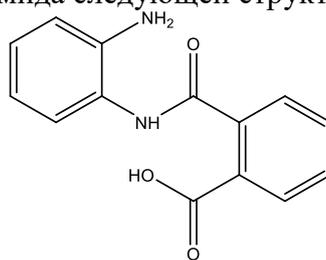
Задание 4. По ИК спектру (жидкая пленка) и брутто-формуле $C_9H_{13}O_2N$ определите структурные элементы соединения.



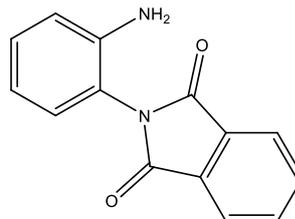
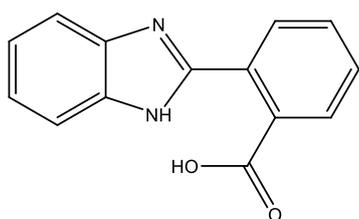
Задание 5. В какой форме - открытой или лактонной - существует левулиновая кислота, если в ИК-спектре найдены полосы $3260, 2970, 2870, 2850, 1720, 1705, 900 \text{ см}^{-1}$?



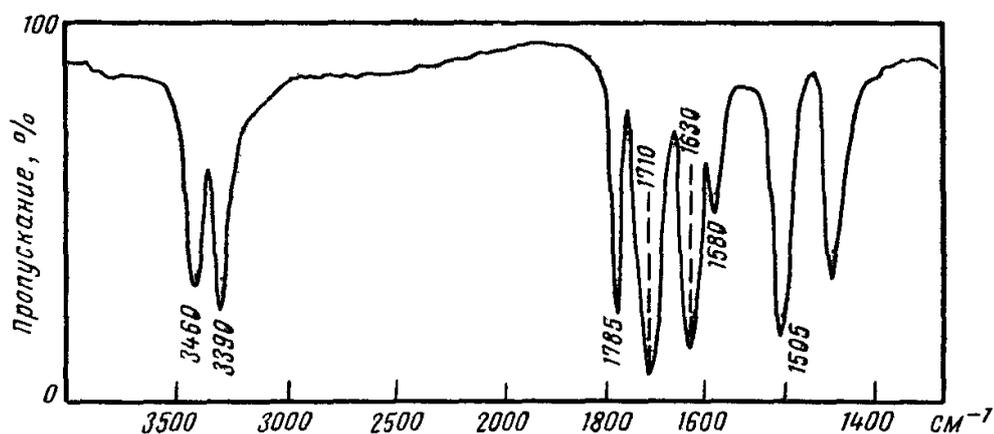
Задание 6. При циклизации амида следующей структуры:



возможно образование двух продуктов реакции:



На рисунке приведен спектр полученного вещества. Какой продукт образовался?

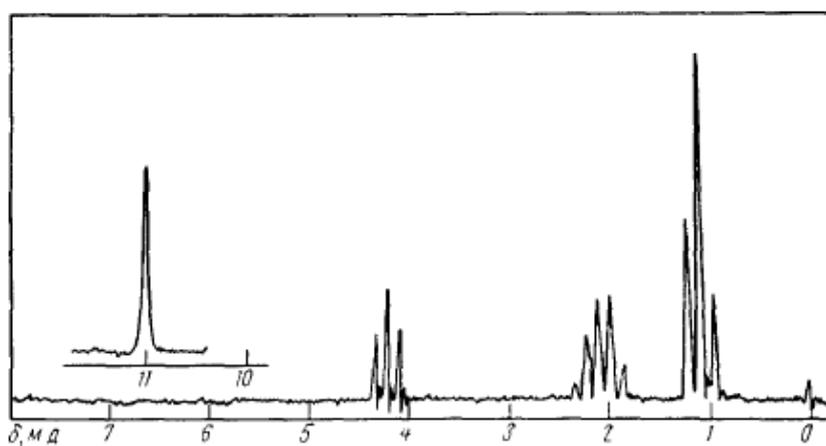


Задание 7. Углеводород C_6H_{12} имеет в ИК-спектре полосы поглощения при 3045 и 1650 см^{-1} . При озоноллизе образуются альдегид и кетон с одинаковым числом атомов углерода в молекуле. Написать структурную формулу углеводорода C_6H_{12} , а также уравнения реакций озоноллиза.

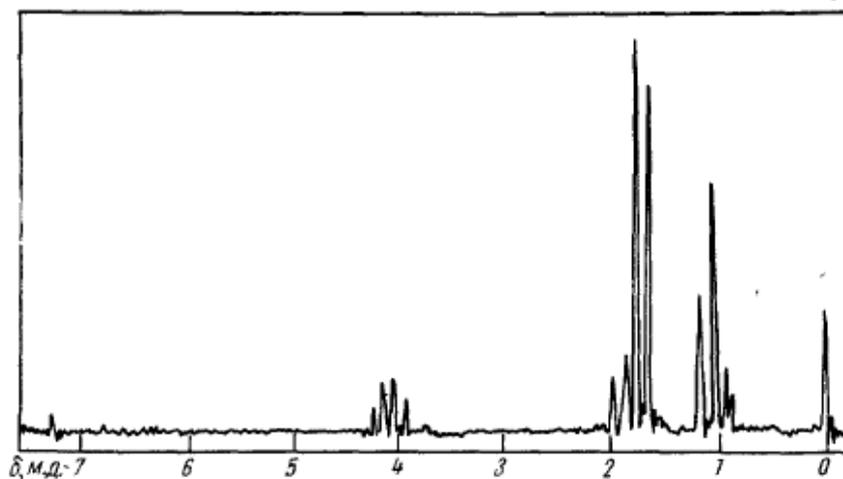
Задание 8. В спектре о-нитротолуола имеются полосы поглощения при 2960, 2870, 1520, 1465, 1380, 1330, 850 и 750 см^{-1} . После проведения реакции в спектре исчезают полосы при 1520, 1330, 850 и 750 см^{-1} и появляются новые полосы при 3420, 3340, 1644 см^{-1} и широкая полоса при 680 см^{-1} . Какая реакция была проведена и с помощью каких реагентов ее можно осуществить?

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

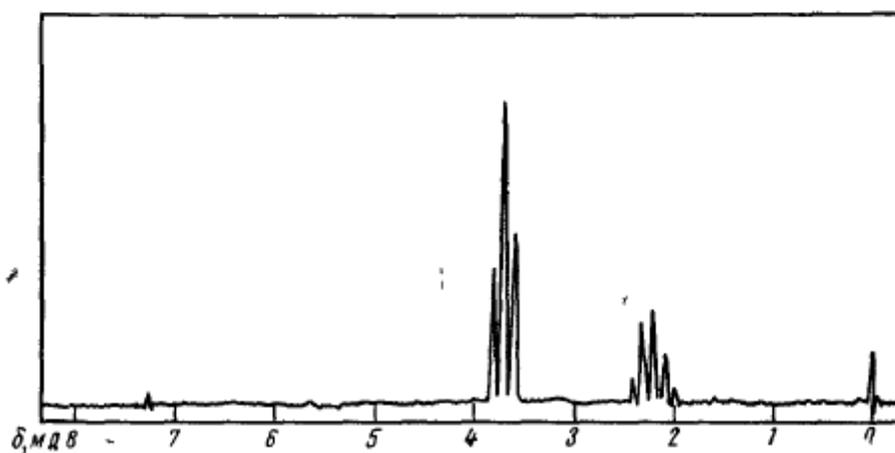
Задание 9. На рисунке приведен ПМР спектр одного из изомеров кислоты $C_3H_5BrCOOH$. Какой это изомер?



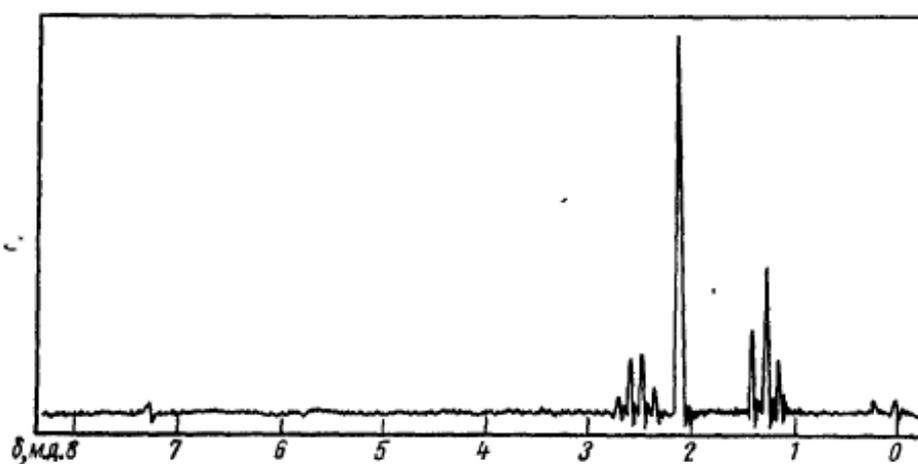
Задание 10. Какому из изомеров бромистого бутила принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



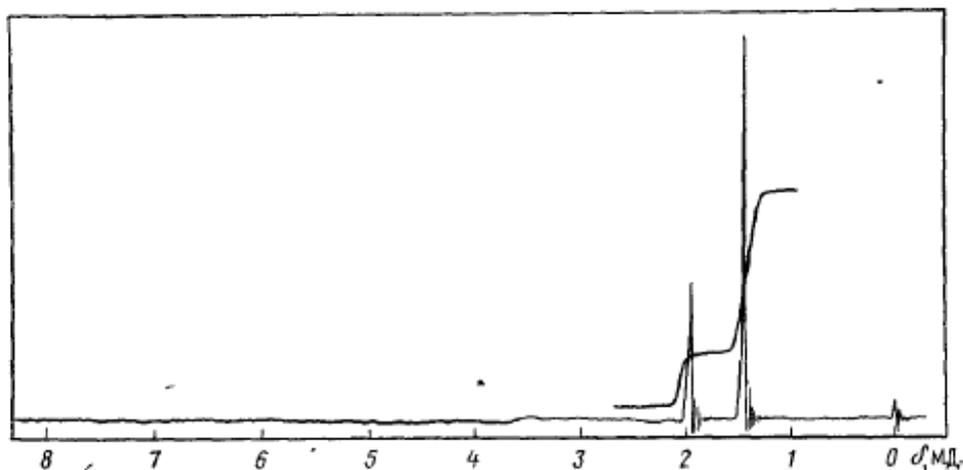
Задание 11. Какому из изомеров дихлорпропана принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



Задание 12. Какое строение имеет соединение с брутто-формулой C_3H_8S , ПМР спектр которого приведен на рисунке?



Задание 13. Спектр соединения $C_6H_{12}O_2$ приведен на рисунке. Определите строение этого соединения.



Задание 14. При гидролизе кеталя $C_{10}H_{16}O_4$ (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.

Задание 15. После обработки циклопентадиена (два сигнала при 2,9 и 6,4 м.д.) суспензией натрия в абсолютном ТГФ образуется соединение, дающее лишь один сигнал в спектре ПМР (5.57 м.д.). Объясните происходящее явление.

Задание 16. Определите процентный состав компонентов газовой смеси по следующим данным, полученным с помощью газовой хроматографии (S -площадь пика, mm^2 ; k -поправочный коэффициент, определяемый чувствительностью детектора хроматографа к определенному компоненту):

Компоненты смеси	S, mm^2	k
Пропан	175	0,68
Бутан	203	0,68
Пентан	182	0,69
Циклогексан	35	0,85

Задание 17. Рассчитайте процентный состав смеси газов по следующим данным, полученным при газовой хроматографии смеси:

Газ	Вариант I		Вариант II		Вариант III		Вариант IV	
	S*	k*	S	k	S	k	S	k
Пропан . . .	216	1,13	155	0,68	300	1,13	205	0,68
Бутан . . .	312	1,11	216	0,68	—	—	97	0,68
Пентан . . .	22	1,11	198	0,69	208	1,11	—	—
Циклогексан	34	1,08	28	0,85	18	1,08	48	0,85
Пропилен .	—	—	—	—	—	—	22	0,65

Задание 18. Реакционную массу после нитрования толуола проанализировали методом газожидкостной хроматографии с применением этилбензола в качестве внутреннего стандарта. Определить процент непрореагировавшего толуола по следующим экспериментальным данным:

Варианты	I	II	III	IV
Взято толуола, г	12,7500	15,2605	8,5412	25,1639
Внесено этилбензола, г	1,2530	1,0865	2,7522	1,2873
$S_{\text{толуола}}$, мм ²	307	108,5	55,3	80,7
$k_{\text{толуола}}$	1,01	0,794	1,01	0,794
$S_{\text{этилбензола}}$, мм ²	352	157,7	80,1	109,2
$k_{\text{этилбензола}}$	1,02	0,822	1,02	0,822

Задание 19. Определите процентный состав компонентов газовой смеси по следующим данным, полученным с помощью газовой хроматографии:

Вариант I			Вариант II		
Газ	S	k	Газ	S	k
Этанол	3524,2	0,64	Метан	207	1,23
Метанол	13,4	0,58	Этан	4	1,15

Вариант III			Вариант IV		
Газ	S	k	Газ	S	k
Динитробензол . . .	305	1,22	Этилацетат	305,2	0,79
Нитробензол	12	1,07	Этанол	11,7	0,64

Задание 20. Рассчитайте процентный состав смеси газов по следующим данным, полученным при газовой хроматографии смеси:

Вариант I			Вариант II			Вариант III		
Газ	S	k	Газ	S	k	Газ	S	k
Бензол . .	20,6	0,78	o-Ксилол . .	16,7	0,840	Бензол . .	85	1,00
Толуол . .	22,9	0,79	m-Ксилол . .	20,3	0,812	Гексан . .	27	1,11
Этилбензол .	30,5	0,82	n-Ксилол . .	8,5	0,812	Пропилен .	34	1,08
Кумол . . .	16,7	0,84	Этилбензол .	30,4	0,820	Этанол . .	11	1,77

2 Примеры вопросов для устного опроса

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.
14. Физические основы метода ядерного магнитного резонанса. Тонкая и сверхтонкая структуры сигналов ядер.
15. Принцип работы ЯМР спектрометра.
16. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса, приемы упрощения сложных спектров.
17. 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.

18. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия $J_{\text{C-H}}$, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов.

19. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы).

20. Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C .

21. Физические основы метода ЭПР. Положение резонансного сигнала и g -фактор. Тонкая и сверхтонкая структура спектров ЭПР.

22. Применение спектроскопии ЭПР для структурных исследований.

23. Физические основы метода масс-спектропии: принцип работы масс-спектрометра, образование масс-спектра, типы регистрируемых ионов.

24. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру.

25. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации.

26. Масс-спектрометрические правила. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре.

27. Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

28. Особенности метода хромато-масс-спектрометрии. Сочетание газового хроматографа с масс-спектрометрическим детектором. Установление количества соединения в образце по площади хроматографического пика.

3 Примеры вопросов к практическим и лабораторным работам

1. Объясните происхождение спектров испускания (эмиссионных) и поглощения (абсорбционных) атомов и молекул с позиций квантовой теории.

2. 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.

3. Какие типы переходов в молекуле вызываются поглощением а) ультрафиолетового; б) видимого; в) инфракрасного излучения?

4. Изобразите схематически расположение энергетических уровней, соответствующих σ -, π - и n -молекулярным орбиталям, и укажите возможные типы электронных переходов между ними.

5. Почему спектр поглощения имеет вид полос, а не отдельных линий?

6. Чем характеризуется высота и форма максимума в спектре поглощения? От каких факторов зависят эти величины?

7. Какое влияние оказывает растворитель на электронный спектр молекулы? Что называют батохромным и гипсохромным сдвигом?

8. Назовите основные типы молекулярных колебаний.

9. В каком спектральном интервале в качестве источника света используют лампы накаливания, водородную лампу, штифт Нернста, силитовый глобар, ртутную лампу?

10. Для каких областей спектра предназначены приборы, оптические детали которых выполнены из: а) стекла; б) кварца; в) поваренной соли; г) флюорита?

11. Какие преимущества дает программирование температуры в газовой хроматографии?
12. Почему следует избегать нанесения больших объемов пробы при хроматографировании на бумаге?
13. Почему в количественном хроматографическом анализе предпочитают измерять высоту узких и площадь широких пиков?
14. В чем преимущества элюентной хроматографии перед фронтальной и вытеснительной?
15. Назовите основные параметры хроматографических пиков и способы их определения.
16. На чем основан принцип разделения аминокислот на анионообменных смолах?
17. Какие вы знаете методы детектирования в тонкослойной хроматографии?
18. Каким образом из данных ТСХ определяется величина коэффициента удерживания?
19. Что характеризует величина R_f в хроматографии и как ее определяют?

4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов для подготовки к зачету

1. Определение функциональных групп в органических соединениях, качественный и количественный органический анализ.
2. Химические способы определения гидроксильной и карбонильной группы. Определение карбоновых кислот и их производных. Методы химической идентификации ненасыщенных углерод-углеродных связей.
3. Определение активных атомов водорода. Химическая идентификация функциональных групп с атомом азота. Анализ серосодержащих соединений.
4. Теории хроматографического разделения. Понятие о факторе разрешения.
5. Устройство газового хроматографа. Виды детекторов в газовой хроматографии.
6. Неподвижные фазы для газовой хроматографии. Индексы удерживания. Качественный и количественный газохроматографический анализ.
7. Сочетание хроматографии и спектроскопии. Хромато-масс-спектрометрия.
8. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Аппаратура для ВЭЖХ. Виды детекторов в ВЭЖХ.
9. Элюотропный ряд растворителей. Жидкостная адсорбционная хроматография.
10. Ионная хроматография и ее типы. Основные принципы гель-хроматографии.
11. Тонкослойная хроматография. Техника проведения анализа методом ТСХ. Подбор элюентов. Детектирование в ТСХ.
12. Применение тонкослойной хроматографии для идентификации различных классов органических веществ.
13. Сверхкритическая флюидная хроматография. Физические основы метода. Подвижные и неподвижные фазы. Аппаратура для СФХ.
14. Капиллярный электрофорез. Общие принципы разделения и оборудование в методе капиллярного электрофореза. Применение электрофоретических методов.
15. Спектроскопические методы исследования. Комплексное использование спектроскопических методов в целях идентификации веществ и установления их химического строения.
16. Принцип работы масс-спектрометра, образование масс-спектра, типы регистрируемых ионов. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру.
17. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений. Масс-спектрометрические правила.

18. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом.
19. Понятие о методе химической ионизации и хроматомасс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.
20. Электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.
21. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул, классификация полос поглощения в электронных спектрах.
22. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп, правила Вудворда-Физера.
23. Принцип работы УФ спектрофотометра. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.
24. Физические основы метода ИК спектроскопии: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул.
25. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений.
26. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа.
27. Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров.
28. Магнитные свойства ядер, тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер. Принцип работы ЯМР спектрометра.
29. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H} .
30. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C , константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H} , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов.
31. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР.

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

5.1 Основная литература:

- 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. Беккер, Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс] / Ю. Беккер; пер. Л. Н. Казанцева. - М.: Техносфера, 2009. - 528 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=88994&sr=.
3. Беккер, Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза [Электронный ресурс] / Ю. Беккер; пер. В. С. Курова. - М.: Техносфера, 2009. - 472 с. - Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89008.

5.2 Дополнительная литература:

1. 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.

2. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст]. Ч. 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынюк. – М.: Техносфера, 2016. - 285 с.

3. 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.

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.

2 Успехи химии - российский научный журнал, публикующий обзорные статьи по актуальным проблемам химии и смежных наук.

3 Журнал общей химии - российский научный журнал, публикующий статьи, посвященные общим вопросам химии, основным закономерностям в свойствах и превращениях органических, элементоорганических и неорганических соединений, взаимному влиянию атомов и реакционной способности химических соединений, исследования природных соединений и их синтетических аналогов.

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)

Самостоятельная работа аспирантов на 4-ом курсе

№	Наименование раздела	Вид самостоятельной работы
---	----------------------	----------------------------

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 – устный опрос
3.	Решение задач	Изучение материала, необходимого для успешного решения задач, а также непосредственное их выполнение. Форма контроля – проверка самостоятельно решенных задач преподавателем.

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

8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

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

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

Для проведения занятий по дисциплине «Современные методы исследования структуры органических веществ», предусмотренной учебным планом подготовки аспирантов, имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) 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	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – ауд. 425с, ул. Ставропольская, 149 (комплект учебной мебели, меловая доска, переносное мультимедийное оборудование).
3.	Лабораторные занятия	Учебная аудитория для проведения занятий лабораторного типа – ауд. 414с, ул. Ставропольская, 149 (учебная лаборатория, укомплектованная специализированной мебелью, вытяжной системой вентиляции, меловой доской, средствами пожарной безопасности и оказания первой медицинской помощи, лабораторным оборудованием: весы лабораторные электронные А&ДЕК-410i, электроплитки, сушильный шкаф, мешалки механические, мешалки магнитные ИКА HS 7, ротационные испарители, наборы химической посуды и реактивов).

4.	Курсовое проектирование	Не предусмотрено 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).