

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

Протокол № \_\_\_\_\_ от «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 г.  
и инвестиционной деятельности  
«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 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 аспиранта Преподаватель. Исследователь-преподаватель.

Кандидат химических наук

Форма обучения очная

Краснодар 2018



## 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 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-	основные методы научно-исследовательской деятельности, основные принципы и подходы в реализации конкретных методов синтеза органических соединений.	выстраивать синтетическую схему с учетом конкретной задачи, выполнять синтетические процедуры и расчеты по построенным схемам, производить их статистическую обработку.	навыками выбора методов и средств решения задач исследования, навыками химического эксперимента, основными методами получения и обработки результатов

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
		коммуникационных технологий			анализа.
2.	ПК-2	Готовность к самостоятельным научным исследованиям в области направленного синтеза органических соединений, установления их строения и реакционной способности, и оформлению результатов исследований в виде диссертации согласно требованиям ВАК РФ	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 хроматографических и спектральных методов исследования	навыками применения современных и классических методов исследования строения и состава органических соединений

## 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
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	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		
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	54	54
В том числе:		
Оформление лабораторных работ и подготовка к их защите	12	12
Изучение теоретического материала	42	42
<b>Контроль</b>		
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

№ разд ела	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	устный опрос, практическая работа №1

		спектроскопии. Хромато-масс-спектрометрия.	
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 хроматография и ее типы. Основные принципы гель-хроматографии.	устный опрос
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. Количественная ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру.	защита лабораторной работы № 3
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	Семинар по теме «Химический анализ функциональных групп».	устный опрос

	идентификации органических соединений		
2.	Газовая хроматография	Практическая работа по теме «Качественный и количественный анализ жидкой смеси углеводов 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.	
6.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Расчет химических сдвигов по инкрементам. Расшифровка ПМР спектров первого порядка. Совместное использование спектров ПМР и ЯМР <sup>13</sup> C для идентификации органических соединений. Решение задач.	решение задач
7.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Использование компьютерных программ, моделирующих ЯМР спектры.	
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.	контрольная работа

### 2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование раздела	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Химические методы идентификации органических	Химическая идентификация органических веществ.	защита лабораторной работы № 1

	соединений		
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)

№	Наименование раздела	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1.	Химическая идентификация органических веществ	1. Сиггия С., Ханна Дж. Количественный анализ по функциональным группам. М.: Химия, 1983. 2. Климова В.А. Основные микрометоды анализа органических соединений. М.: Химия, 1975. 3. Шрайнер Р., Фьюзон Р., Кёртин Д., Моррилл Т. Идентификация органических соединений. М.: Мир, 1983.
2.	Газовая хроматография	1. Беккер Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза. М.: Техносфера, 2009. 2. Киселев А., Яшин Я. Адсорбционная газовая и жидкостная хроматография. М.: Химия, 1979.
3.	Жидкостная хроматография	1. Беккер Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза. М.: Техносфера, 2009. 2. Хенке Х. Жидкостная хроматография. М.: Техносфера, 2009. 3. Препаративная жидкостная хроматография. / Под ред. Б. Бидлингмейера. М.: Мир, 1990. 4. Кирхнер Ю. Тонкослойная хроматография. В 2-х томах. М.: Мир, 1981. 5. Жидкостная колоночная хроматография. В 3-х томах. / Под ред. З. Дейла. М.: Мир, 1978.
4.	Масс-спектрометрия	1. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: Бином, 2009. 2. Сильверстейн Р., Вебстер Ф, Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Бином, 2012. 3. Терентьев П.Б. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: Высшая школа, 1979.

5.	Электронная УФ спектроскопия	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Беккер Ю. Спектроскопия. М.: Техносфера, 2009.</li> <li>2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, 2003.</li> <li>3. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа, 1971.</li> <li>4. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В., Физические методы определения строения органических молекул. М.: Высшая школа, 1984.</li> <li>5. Штерн Э., Тиммонс К. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии. М.: Мир, 1974.</li> <li>6. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Л.: Химия, 1985.</li> </ol>
6.	Колебательная ИК спектроскопия	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Сильверстейн Р., Вебстер Ф, Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Бином, 2012.</li> <li>2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, 2003.</li> <li>3. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа, 1971.</li> <li>4. Браун Д., Флойд А, Сейзбери М. Спектроскопия органических веществ. М.: Мир, 1992.</li> <li>5. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М.: Мир, 1965.</li> <li>6. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул. М.: Изд-во ИЛ, 1962.</li> <li>7. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. М.: Химия, 1985.</li> </ol>
7.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Сильверстейн Р., Вебстер Ф, Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Бином, 2012.</li> <li>2. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа, 1971.</li> <li>3. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. М.: Химия, 1985.</li> <li>4. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В., Физические методы определения строения органических молекул. М.: Высшая школа, 1984.</li> <li>5. Ионин Б.И., Ершов Б.А., Кольцов А.И. ЯМР-спектроскопия в органической химии. Л.: Химия, 1983.</li> <li>6. Жунке А. Ядерный магнитный резонанс в органической химии. М.: Мир, 1974.</li> <li>7. Эмсли Дж., Финей Дж., Сатклиф Л. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса высокого разрешения. В 2-х томах. М.: Мир, 1978.</li> </ol>

### 3. Образовательные технологии

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

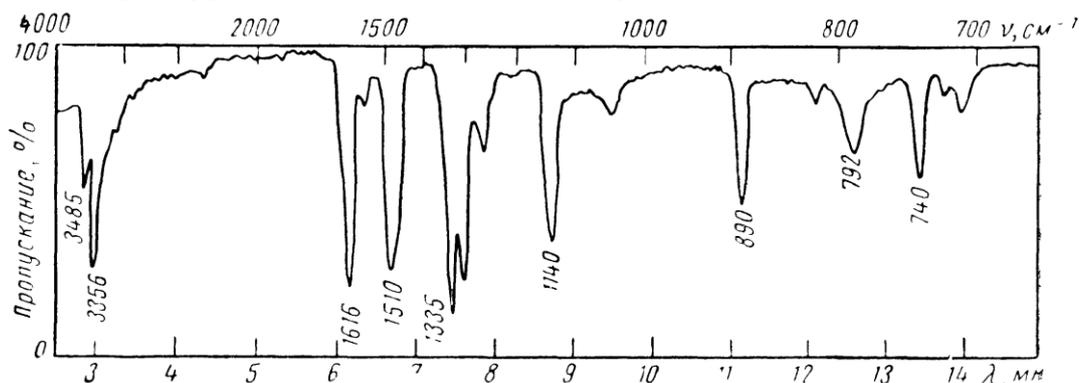
- |                        |                           |
|------------------------|---------------------------|
| 1. Лекционные занятия: | 2. Практические занятия:  |
| а) традиционная лекция | а) семинар                |
| б) лекция-дискуссия    | б) «Мозговой штурм»       |
|                        | в) кооперативное обучение |

#### 4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

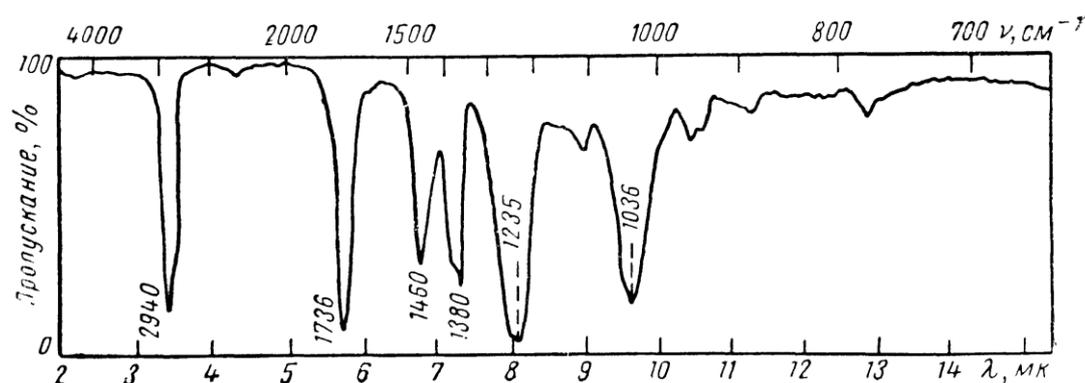
##### 4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

*Примеры задач для самостоятельного решения*

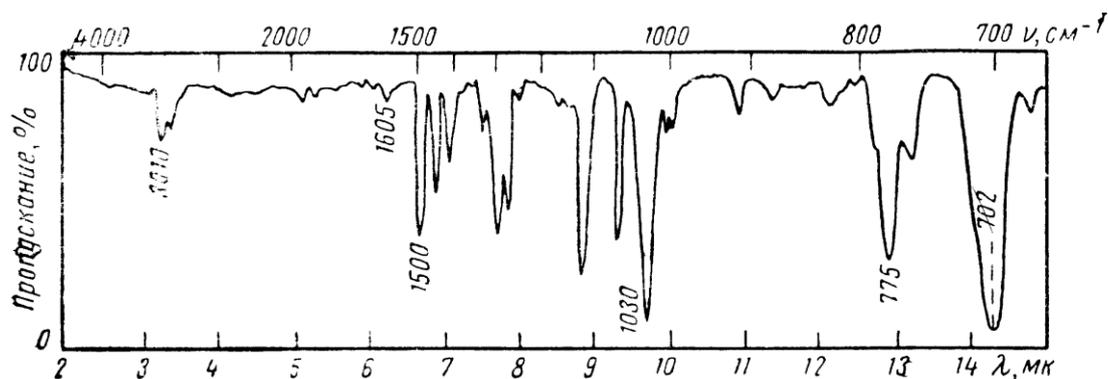
**Задание 1.** Соединение с брутто-формулой  $C_6H_4Cl_2N_2O_2$  имеет спектр, приведенный на рисунке (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.



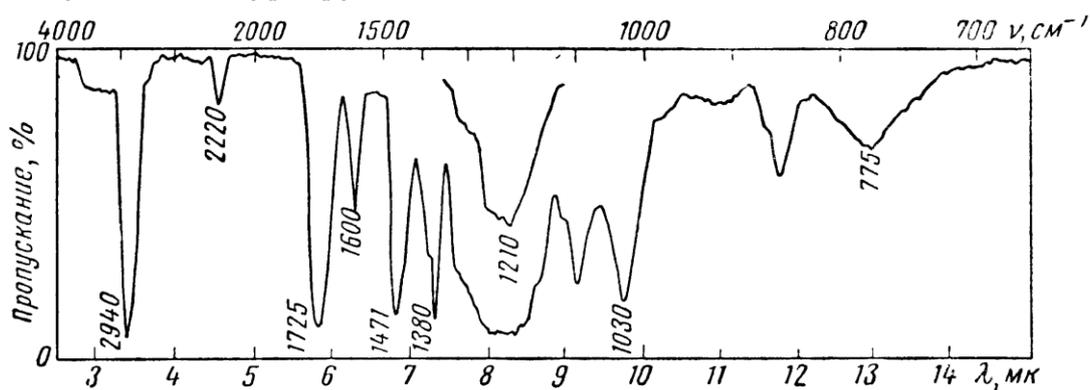
**Задание 2.** В какие функциональные группы входят атомы кислорода в соединении с брутто-формулой  $C_8H_{16}O_2$  (спектр жидкой пленки)?



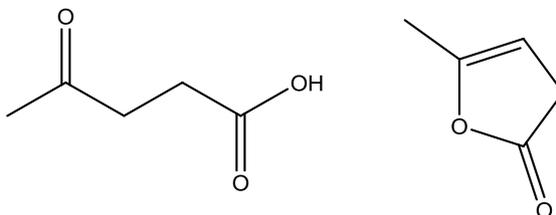
**Задание 3.** Проведите сопоставление полос поглощения в ИК спектре, приведенном на рисунке (в пластинке KBr), со структурой соединения  $(C_6H_5CH_2)_2SO$ .



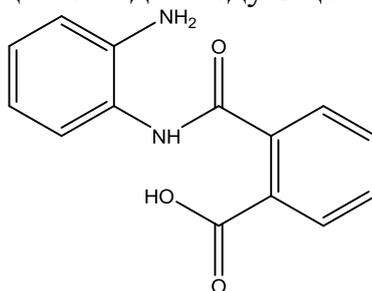
**Задание 4.** По ИК спектру (жидкая пленка) и брутто-формуле  $C_9H_{13}O_2N$  определите структурные элементы соединения.



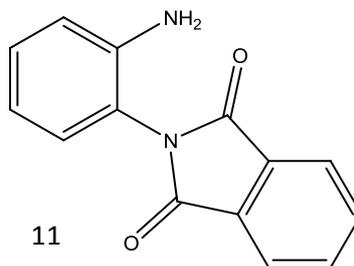
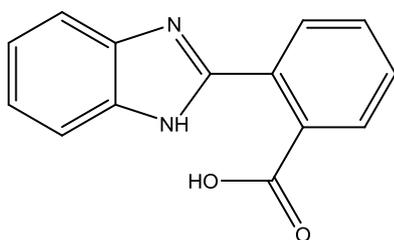
**Задание 5.** В какой форме - открытой или лактонной - существует левулиновая кислота, если в ИК-спектре найдены полосы  $3260, 2970, 2870, 2850, 1720, 1705, 900 \text{ cm}^{-1}$ ?



**Задание 6.** При циклизации амида следующей структуры:

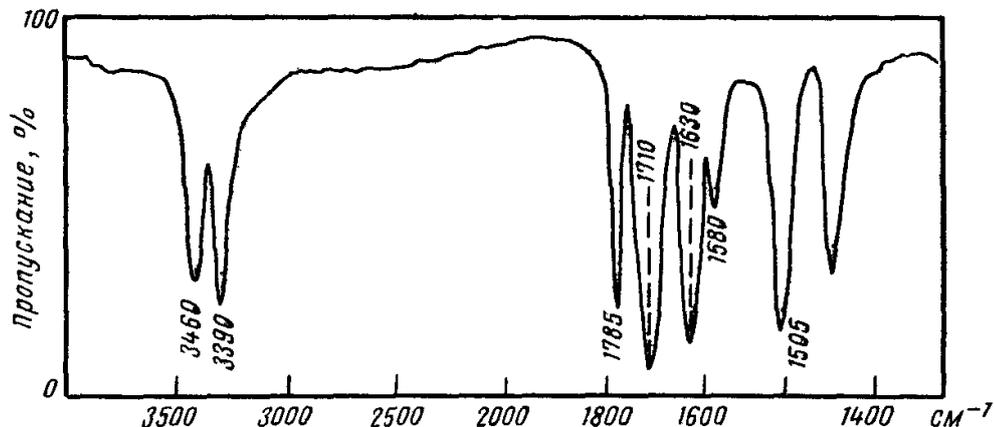


возможно образование двух продуктов реакции:



11

На рисунке приведен спектр полученного вещества. Какой продукт образовался?

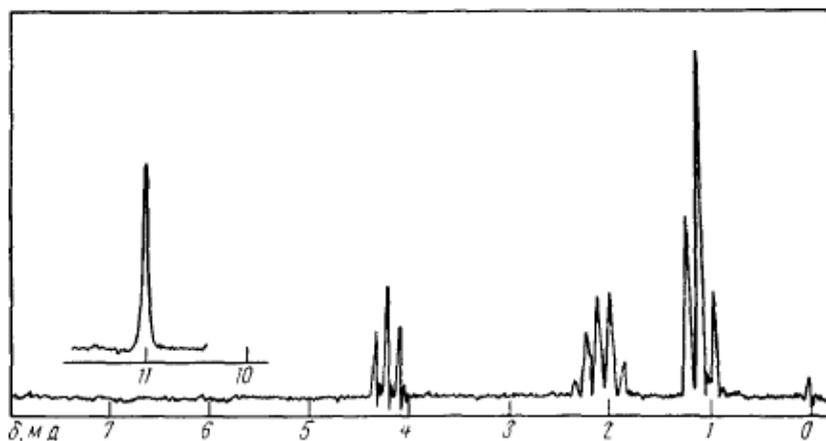


**Задание 7.** Углеводород  $C_6H_{12}$  имеет в ИК-спектре полосы поглощения при 3045 и 1650  $cm^{-1}$ . При озоноллизе образуются альдегид и кетон с одинаковым числом атомов углерода в молекуле. Написать структурную формулу углеводорода  $C_6H_{12}$ , а также уравнения реакций озоноллиза.

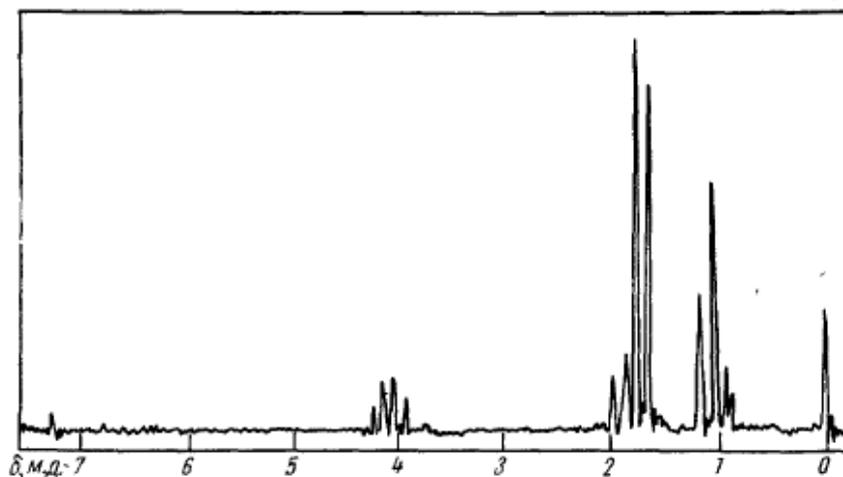
**Задание 8.** В спектре о-нитротолуола имеются полосы поглощения при 2960, 2870, 1520, 1465, 1380, 1330, 850 и 750  $cm^{-1}$ . После проведения реакции в спектре исчезают полосы при 1520, 1330, 850 и 750  $cm^{-1}$  и появляются новые полосы при 3420, 3340, 1644  $cm^{-1}$  и широкая полоса при 680  $cm^{-1}$ . 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?

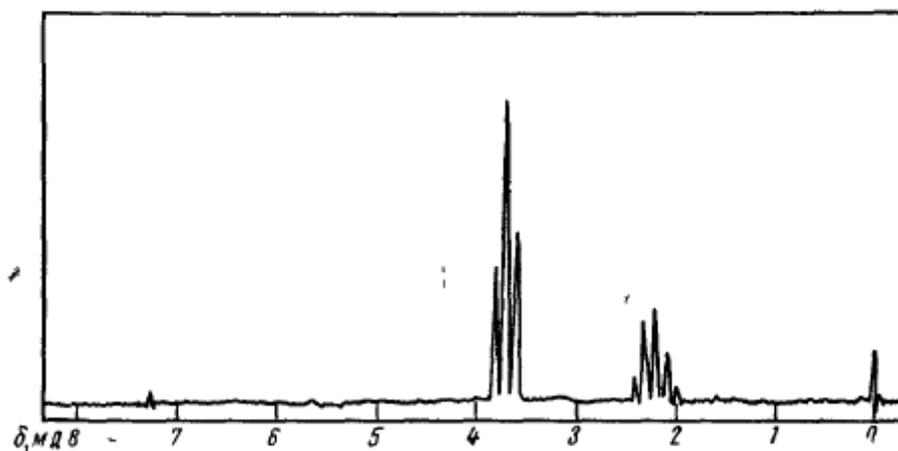
**Задание 9.** На рисунке приведен ПМР спектр одного из изомеров кислоты  $C_3H_8BrCOOH$ . Какой это изомер?



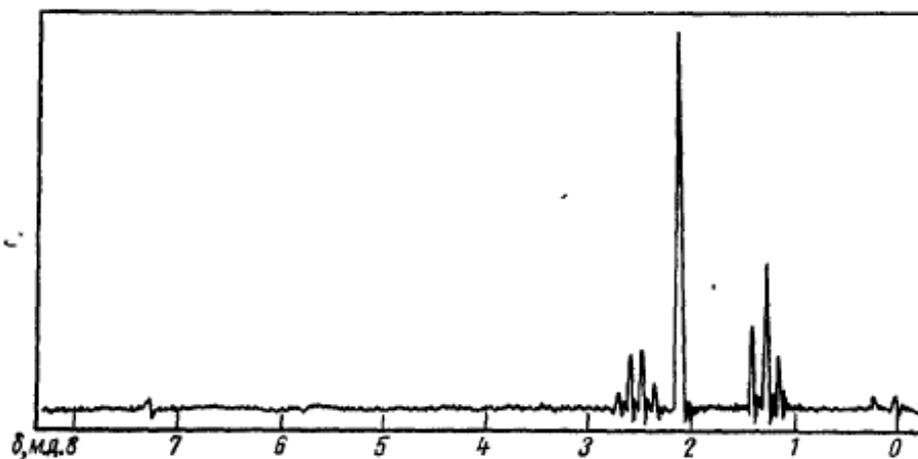
**Задание 10.** Какому из изомеров бромистого бутила принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



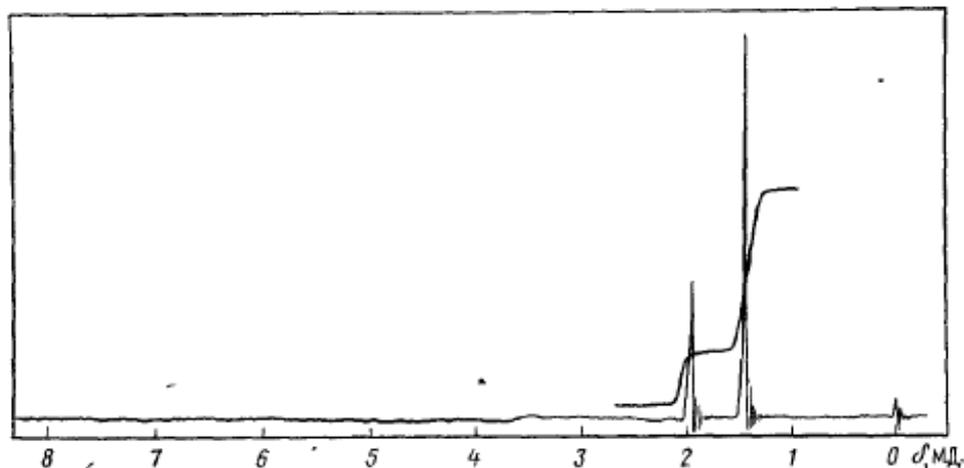
**Задание 11.** Какому из изомеров дихлорпропана принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



**Задание 12.** Какое строение имеет соединение с брутто-формулой  $\text{C}_3\text{H}_8\text{S}$ , 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 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 НДО, 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 абсолютированном ТГФ образуется соединение, дающее лишь один сигнал в спектре ПМР (5.57 м.д.). Объясните происходящее явление.

#### 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 геле-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. Сергеев, Николай Александрович. Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса [Текст] / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - Москва : Логос, 2013. - 270 с. - Библиогр.: с. 264-270. - ISBN 9785987047545 : 668.44.
2. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков [Текст] : [учебник для химических специальностей вузов] / Ю. М. Воловенко, В. Г. Карцев, И. В. Комаров и др. - [Москва] : [Международный благотворительный фонд "Научное Партнерство"] : ICSPF Press, 2011. - 694 с. : ил. - Библиогр.: с. 680. - ISBN 9785903078349 : 209.00.
3. Устынюк, Ю. А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Электронный ресурс] . Ч. 1 : Вводный курс / Устынюк Ю. А. - М. : Техносфера, 2016.  
[https://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=444862&sr=1](https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=444862&sr=1).

4. Спектральные методы анализа [Электронный ресурс] : практическое руководство / Васильева В. И., Стоянова О. Ф., Шкутина И. В., Карпов С. И. - СПб. : Лань, 2014. - 416 с. - <https://e.lanbook.com/book/50168>.

### 5.2 Дополнительная литература:

1. Устынюк, Юрий Александрович. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст] . Ч. 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынюк. - Москва : Техносфера, 2016. - 285 с. : ил. - (Мир химии). - Библиогр.: с. 285. - ISBN 978-5-94836-410-0 : 634 р. 89 к..
2. Спектральные методы анализа [Текст] : практическое руководство : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Васильева, О. Ф. Стоянова, И. В. Шкутина и др. ; под ред. В. Ф. Селеменова и В. Н. Семенова. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2014. - 412 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 9785811416387 : 850.08..
3. Шмидт, Вернер. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов [Текст] / В. Шмидт ; пер. с англ. Н. П. Ивановской ; под ред. С. В. Савилова. - М. : Техносфера, 2007. - 367 с., [3] л. ил. : ил. - (Мир физики и техники). - Библиогр. в конце глав. - ISBN 9785948361406. - ISBN 9783527299119 : 383.00..

### 5.3. Периодические издания:

1. Успехи химии.
2. Журнал аналитической химии.

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

1. <http://journal.issep.rssi.ru/> - Соросовский образовательный журнал;
2. <http://www.chem.msu.ru/> - сайт химического факультета Московского государственного университета
3. <http://elibrary.ru> - научная электронная библиотека, содержащая рефераты и полные тексты научных статей и публикаций;
4. <http://scholar.google.ru/> - поисковая система, направленная на поиск научной и научно-технической информации;
5. <http://www.chemspider.com/> - база данных по органическим соединениям.

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

### Самостоятельная работа аспирантов на 4-ом курсе

№	Наименование раздела	Вид самостоятельной работы	Форма контроля
1	2	3	4
1.	Химическая идентификация органических веществ	Оформление лабораторных работ и подготовка к их защите.	защита лабораторной работы № 1
2.	Газовая хроматография	Изучение лекционного и дополнительного теоретического материала.	практическая работа №1
3.	Жидкостная хроматография	Изучение лекционного и дополнительного теоретического материала. Оформление лабораторных работ и подготовка к их защите.	защита лабораторной работы № 2
4.	Масс-спектрометрия	Изучение лекционного и дополнительного теоретического материала. Решение задач.	практическая работа №2
5.	Электронная УФ спектроскопия	Изучение лекционного и дополнительного теоретического материала. Решение задач.	
6.	Колебательная ИК спектроскопия	Изучение лекционного и дополнительного теоретического материала. Оформление лабораторных работ и подготовка к их защите. Решение задач.	защита лабораторной работы № 3
7.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Изучение лекционного и дополнительного теоретического материала. Решение задач.	практическая работа №3; контрольная работа

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

### 8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

1. Редактор химических формул ChemSketch из программного пакета ACD Labs.
2. Программный комплекс для регистрации и обработки ИК-спектров СпектраЛЮМ.
3. Программный комплекс для регистрации и обработки Хромато-масс-спектральных данных Shimadzu.
4. Программа для проведения полуэмпирических квантово-химических расчетов WinMoras.

## **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:

- лекционная аудитория, оснащенная экранным проектором и маркерной доской для демонстрации лекционного материала;
- учебная лаборатория (15 рабочих мест), оснащенная необходимым оборудованием для синтеза и исследования химических свойств различных органических и элементоорганических соединений;
- специализированная учебно-исследовательская лаборатория, оснащенная приборами для идентификации и исследования строения органических веществ (УФ-спектрофотометр Leki SS2109UV, ИК-спектрометр ИнфраЛЮМ ФТ-02, хромато-масс-спектрометр Shimadzu GCMS QP2010S), а также 7 персональными компьютерами с необходимым программным обеспечением.