

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО

Руководитель ОПОП

_____ А.В. Великородов

21 июня 2024 г.

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ХМ

_____ Л.А. Джигола

21 июня 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ
ВЕЩЕСТВ**

Составитель	Тырков А.Г., профессор, д.х.н., профессор
Направление подготовки	04.03.01 «ХИМИЯ»
Направленность (профиль) ОПОП	Медицинская и фармацевтическая химия
Квалификация (степень)	бакалавр
Форма обучения	очно-заочная
Год приема	2020
Курс	5
Семестр	9

Астрахань- 2024 г.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целями освоения дисциплины «Спектральные методы исследования лекарственных веществ» ознакомить студентов с основными свойствами фармацевтических препаратов и основными законами, лежащими в основе спектральных методов анализа.

1.2. Задачи освоения дисциплины: рассмотреть теоретические основы и примеры использования современных спектральных методов исследования при анализе различных лекарственных средств, научить выбирать необходимые методики для эффективного анализа фармпрепаратов; проводить интерпретацию результатов спектрального анализа фармпрепаратов; организовывать и проводить химическую экспертизу фармацевтических препаратов с помощью спектральных методов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина «Спектральные методы исследования веществ» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений учебного плана подготовки бакалавров химии и осваивается в 9 семестре. Учебный курс логически связан с теоретическими основами неорганической и аналитической химии. Следовательно, «входные» знания и умения обучающегося связаны со знанием теоретических основ вышеобозначенных учебных химических и биологических дисциплин.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины (модуля) необходимы следующие знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами (модулями):

- неорганическая химия (основные классы неорганических соединений и их превращения);
- аналитическая химия (аналитические методы исследования веществ).

Знания: технических средств и методов испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности, состав, строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений (углеводородов гомофункциональных соединений, гетерофункциональных соединений, гетероциклических соединений).

Умения: готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам.

Навыки: пользоваться физико-химическими методами анализа органических соединений.

2.3. Последующие учебные дисциплины (модули) и (или) практики, для которых необходимы знания, умения, навыки, формируемые данной учебной дисциплиной (модулем):

- основы органической химии лекарственных веществ;
- органические экотоксиканты;
- катализ у тонком органическом синтезе лекарственных веществ.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС 3++ и ОПОП по данному направлению подготовки:

в) профессиональных (ПК):

ПК-2. «Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности».

ПК-3. «Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного про-

исхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам».

Таблица 1 - Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ПК-2 Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	ИПК-2.1. способы выбора технических средств и методов испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач	ИПК-2.2. применять способы выбора технических средств и методов испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач	ИПК-2.3. способами выбора технических средств и методов испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач
ПК-3 Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам	ИОПК-3.1. Способы проведения экспериментальных работ по готовым методикам	ИОПК-3.2. Проводить экспериментальные работы по готовым методикам	ИОПК-3.3. Способами проведения экспериментальных работ по готовым методикам

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины в соответствии с учебным планом составляет 4 зачетные единицы (144 часа).

Трудоемкость отдельных видов учебной работы студентов очной формы обучения приведена в таблице 2.

Таблица 2 - Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела (темы)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Сам. работа		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
1	Колебательная спектроскопия	9	4		8		22	Собеседование
2	Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	9	2		4		20	Собеседование
3	Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	9	4		8		20	Собеседование
4	Масс-спектрометрия	9	2		4		20	Собеседование
5	Электронная спектроскопия	9	2		4		20	Собеседование
	Итого		14		28		102	9 семестр экзамен

Условные обозначения:

Л – занятия лекционного типа; ПЗ – практические занятия, семинары,

ЛР – лабораторные работы; СР - самостоятельная работа по отдельным темам; КР - курсовая работа

Таблица 3 - Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых компетенций

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции		
		ПК-2	ПК-3	Σ общее количество компетенций
Колебательная спектроскопия	34	+	+	2
Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	26	+	+	2
Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	32	+	+	2
Масс-спектрометрия	26	+	+	2

Электронная спектроскопия	26	+	+	2
<i>Итого</i>	144			

Содержание учебной дисциплины.

Тема. Колебательная спектроскопия.

Проявление колебательных переходов в спектрах инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР), правила отбора. Валентные и деформационные колебания, характеристические частоты, применение ИК и КР-спектроскопии в химических исследованиях. Электронно-колебательное взаимодействие, эффект Яна-Теллера. Влияние электронно-колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы. Вращательная спектроскопия. Связь ядерного спина и вращения. Вращательные уровни энергии и волновые функции для различных типов молекул. Определение структуры молекул из вращательных спектров. Колебательно-вращательное взаимодействие, диаграммы Фортра. Связь ядерного спина и вращения молекул.

Тема. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.

Условия магнитного резонанса, устройство радиоспектрометров. Классическая и квантовая интерпретации резонанса. Интенсивность линий, времена релаксации. Насыщение линий. Спин-гамильтониан, константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Число линий и соотношение интенсивностей в спектрах электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), построение спектров ЭПР. Механизмы появления сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР. Дипольный и контактный механизмы СТВ, С-Н-фрагмент, расчет констант СТВ с помощью метода МОХ, расщепление на б-протонах, сверхсопряжение, отрицательные спиновые плотности. Проявление движений радикалов и химических реакций в спектрах ЭПР. Ширина линий ЭПР и анализ движений и химических превращений свободных радикалов. Уравнения Блоха и уравнения МакКоннелла. Обмен по двум положениям, медленный и быстрый обмены. Определение скорости обмена из спектров ЭПР. Обмен по многим положениям. Усреднение анизотропных взаимодействий в спектрах ЭПР. Анизотропия СТВ и g-фактора. Форма линии в твердых растворах, усреднение анизотропии в жидкости. Метод электронного спинового эха, химическая поляризация электронов, лазерный магнитный резонанс.

Тема. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР.

ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования. Тонкая структура спектров ЯМР. Природа расщеплений в спектрах ЯМР. Спин-спиновое взаимодействие, спектра А-В системы, число компонент и соотношение интенсивностей линий в случае слабого и сильного спин-спинового взаимодействия. Связь констант спин-спинового взаимодействия со строением молекул. Проявление химического обмена в спектрах ЯМР, слияние линий при быстром обмене. Спектры ЯМР свободных радикалов. Проявление водородных связей в спектрах ЯМР. Двойной ядерно-ядерный резонанс, химическая поляризация ядер. Спектры NOESY, COESY.

Тема. Масс-спектрометрия.

Физические основы масс-спектрометрического распада. Метастабильные ионы. Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала. Правило Стивенсона-Одье. Правила распада четноэлектронных ионов. Правило степеней свободы. Прочность химических связей. Структурные и стереохимические факторы. Орто-Эффект. Концепция локализации заряда и неспаренного электрона. Фрагментация, удаленная от места локализации заряда. Практические основы интерпретации масс-спектров. Молекулярный ион. Определение элементного состава ионов на основании изотопных пиков. Азотное правило. Определение содержания изотопа C^{13} в природных образцах.

Расчет изотопной чистоты соединений. Фрагментные ионы. Гомологические серии ионов. Выбросы простейших нейтральных частиц. Наиболее интенсивные пики в спектре. Библиотеки масс-спектров. Использование для интерпретации дополнительной масс-спектральной информации. Схема фрагментации. Альтернативные методы ионизации образца. Ионизация фотонами. Химическая ионизация отрицательных ионов. Полевая ионизация. Полевая десорбция. Плазменная десорбционная масс-спектрометрия. Бомбардировка быстрыми атомами, вторичная масс-спектрометрия. Разделение и регистрация ионов. Магнитный секторный масс-спектрометр. Электростатический анализатор. Двухфокусный секторный масс-спектрометр. Масс-спектрометрия высокого разрешения.

Тема. Электронная спектроскопия.

Классификация электронных переходов. Интенсивность и положение полос поглощения. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка-Кондона. Связь спектров поглощения и люминесценции. Время жизни и квантовый выход люминесценции, внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Основные законы люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Люминесценция. Поляризация в спектрах поглощения и люминесценции, формула Левшина-Перрена. Механизмы тушения люминесценции, уравнение Штерма-Фольмера. Перенос энергии по дипольному и обменному механизмам. Лазеры, лазерная спектроскопия. Предиссоциация и её типы. Спектрополяриметрия, оптический круговой дихроизм, эффект Фарадея. Колебательные функции, использование теории групп для определения колебательных состояний. Колебания многоатомных молекул, нормальные колебания, частоты колебаний. Типы колебательных переходов, фундаментальные переходы. Классификация нормальных колебаний с помощью теории групп.

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине

Лекционные занятия проводятся через неделю в объеме 2 часа. Лабораторные работы проводятся каждую неделю в объеме 2 часа. По окончании изучения каждой темы студенты сдают собеседование. По окончании прохождения курса студенты сдают экзамен.

Перечень учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Колосова Т.Ю., Спектральные методы анализа в органической химии: Учебное пособие / Т.Ю. Колосова - Рязань: ООП УИТТиОП, 2017. - 82 с. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента":[сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ryazgmu_001.html (ЭБС «Консультант студента»).
2. Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин Физические методы исследования в химии: Учебник для хим. Вузов - М.: Высшая школа, 2009. – 288 с.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Таблица 4 - Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер темы	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1	Колебательная спектроскопия	22	Лекция, лабораторная работа
2	Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	20	Лекция, лабораторная работа
3	Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	20	Лекция, лабораторная работа
4	Масс-спектрометрия	20	Лекция, лабораторная работа

5	Электронная спектроскопия	20	Лекция, лабораторная работа
---	---------------------------	----	--------------------------------

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины (модуля), выполняемые обучающимися самостоятельно.

Выполнение и оформление лабораторных работ по курсу «Спектральные методы исследования лекарственных веществ» осуществляется в соответствии с учебной программой, размещенной на платформе Moodle.

1. Валентные и деформационные колебания, характеристические частоты, применение ИК и КР-спектроскопии в химических исследованиях.
2. Электронно-колебательное взаимодействие, эффект Яна-Теллера.
3. Влияние электронно-колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы.
4. Механизмы появления сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР.
5. Дипольный и контактный механизмы СТВ, С-Н-фрагмент, расчет констант СТВ с помощью метода МОХ, расщепление на б-протонах, сверхсопряжение, отрицательные спиновые плотности.
6. Проявление движений радикалов и химических реакций в спектрах ЭПР.
7. ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода.
8. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования.
9. Тонкая структура спектров ЯМР. Природа расщеплений в спектрах ЯМР.
10. Физические основы масс-спектрометрического распада.
11. Метастабильные ионы. Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада.
12. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров.
13. Классификация электронных переходов.
14. Интенсивность и положение полос поглощения.
15. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка-Кондона.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в объеме 4 ч. (из них 4 ч лекций) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

6.1. Образовательные технологии

Перечень образовательных технологий сведен в таблицу.

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Колебательная спектроскопия	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Выполнение и отчет по лабораторной работе
Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Выполнение и отчет по лабораторной работе
Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Выполнение и отчет по лабораторной работе
Масс-спектрометрия	Обзорная	Не предусмотрены	Выполнение и отчет по

	лекция		лабораторной работе
Электронная спектро-скопия	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Выполнение и отчет по лабораторной работе
Колебательная спек-троскопия	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Выполнение и отчет по лабораторной работе

6.2. Информационные технологии

Интернет-ресурсы www.asu.edu.ru (представлены учебно-методические материалы для усвоения студентами курса; Электронный образовательный ресурс по курсу «Спектральные методы исследования лекарственных веществ», представленный на платформе moodle по адресу <http://moodle.asu.edu.ru>

Для оперативной связи со студентами предполагается возможность использования электронной почты преподавателя.

6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

6.3.1. Программное обеспечение

- Лицензионное программное обеспечение

Наименование программного обеспечения	Назначение
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle «Электронное образование»	Виртуальная обучающая среда

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Наименование современных профессиональных баз данных, информационных справочных систем
Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» http://dlib.eastview.com Имя пользователя: AstrGU Пароль: AstrGU
Электронные версии периодических изданий, размещённые на сайте информационных ресурсов www.polpred.com
Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» https://library.asu.edu.ru/catalog/
Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек. http://mars.arbicon.ru

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

7.1. Паспорт фонда оценочных средств.

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Спектральные методы исследования лекарственных веществ» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования

данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

Таблица 6 - Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины	Код контролируемой компетенции (компетенций)	Наименование оценочного средства
1	Колебательная спектроскопия	ПК-2, ПК-3	Собеседование
2	Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	ПК-2, ПК-3	Собеседование
3	Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	ПК-2, ПК-3	Собеседование
4	Масс-спектрометрия	ПК-2, ПК-3	Собеседование
5	Электронная спектроскопия	ПК-2, ПК-3	Собеседование

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания приведены в таблице 6.

Таблица 7 - Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний

5 «отлично»	- демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры;
4 «хорошо»	- демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя;
3 «удовлетворительно»	- демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов;
2 «неудовлетворительно»	- демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры.

Таблица 8 - Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задание

7.3. Контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности.

Примерный комплект заданий для проведения собеседования по учебной дисциплине «Спектральные методы исследования лекарственных веществ».

Вопросы для собеседования.

1. Валентные и деформационные колебания, характеристические частоты, применение ИК и КР-спектроскопии в химических исследованиях.
2. Электронно-колебательное взаимодействие, эффект Яна-Теллера.
3. Влияние электронно-колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы.
4. Механизмы появления сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР.
5. Дипольный и контактный механизмы СТВ, C-H-фрагмент, расчет констант СТВ с помощью метода МОХ, расщепление на б-протонах, сверхсопряжение, отрицательные спиновые плотности.
6. Проявление движений радикалов и химических реакций в спектрах ЭПР.
7. ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода.
8. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования.
9. Тонкая структура спектров ЯМР. Природа расщеплений в спектрах ЯМР.
10. Физические основы масс-спектрометрического распада.
11. Метастабильные ионы. Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада.
12. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров.
13. Классификация электронных переходов.
14. Интенсивность и положение полос поглощения.
15. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка-Кондона.

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ПК-2. «Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности»				
1.	Задание закрытого типа	Величину адсорбции из газовой фазы измеряют: а) объемным методом. б) амперометрическим методом. в) весовым методом. г) поляриметрическим методом	а)	3
2.		Выберите одно верное утверждение: а) энергия координационной связи выше, чем энергия ковалентной связи. б) энергия координационной связи ниже, чем энергия ковалентной связи. в) энергия координационной связи равна энергии ковалентной связи	б)	3
3.		Гомолитический разрыв связи О–Н в молекуле воды приводит к образованию: а) $H \bullet + OH^+$. б) $H^+ + OH^-$.	г)	3

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		в) $O_2^{2-} + H_2O + \cdot$ г) $H + + :OH$.		
4.	Задание комбинированного типа	Согласно Рогинскому, каталитические реакции можно разделить на: а) окислительно-восстановительные (одноэлектронные). б) гомофазные. в) кислотно-основные (ионные). г) гетерофазные	в)	3
5.		Выберите утверждение, соответствующее Теории изотерм адсорбции И. Ленгмюра: а) все атомы поверхности имеют энергетически одинаковые адсорбционные центры (рассматривается однородная поверхность). б) на одном центре адсорбируется несколько молекул адсорбата и при заполнении всех центров образуется несколько монослоев. в) взаимодействием между соседними адсорбированными молекулами в теории пренебрегают. г) при адсорбционном равновесии скорость адсорбции не равна скорости десорбции.	а)	5
6.	Задание открытого типа	Выберите одно верное утверждение: а) энергия координационной связи выше, чем энергия ковалентной связи. б) энергия координационной связи ниже, чем энергия ковалентной связи. в) энергия координационной связи равна энергии ковалентной связи	в)	3
7.		Вблизи от равновесия реакции $A \leftrightarrow B$ катализатор ускоряет: а) реакцию $A \rightarrow B$. б) реакцию $B \leftarrow A$. в) в равной степени реакцию $A \rightarrow B$ и $B \leftarrow A$. г) не ускоряет ни одну из выше обозначенных	в)	3

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
8.	Задание комбинированного типа	Величину адсорбции из газовой фазы измеряют: а) объемным методом. б) амперометрическим методом. в) весовым методом. г) поляриметрическим методом	а)	3
9.		Уравнение Генри описывается выражением: а) $a = K_H p$ или $a = K_H c$. б) $a = K_H / p$ или $a = K_H / c$. в) $a = K_H p$ или $a = K_H c$. г) $a = K_H - p$ или $a = K_H - c$.	б)	3
10.		Выберите верное утверждение. Вблизи от равновесия реакции $A \leftrightarrow B$ катализатор ускоряет: а) реакцию $A \rightarrow B$. б) реакцию $B \leftarrow A$. в) в равной степени реакцию $A \rightarrow B$ и $B \leftarrow A$. г) не ускоряет ни одну из выше обозначенных . Объясните почему.	в)	5
ПК-3. «Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам»				
11.	Задание закрытого типа	Наиболее перспективный способ получения акрилонитрила: 1 – ацетиленовый; 2 – реакция окиси этилена с синильной кислотой; 3 – реакция ацетальдегида с синильной кислотой; 4 – реакция пропилена с окисью азота; 5 – окислительный аммонолиз пропилена.	5	2
12.		Какие химические соединения используются в синтезе душистых веществ: 1 – терпены и их производные; 2 – сложные эфиры карбоновых кислот; 3 – продукты гидратации α -пинена; 4 – дифенилоксид; 5 – лимонен.	1,2,3,5	2
13.		Вакер-процесс – это 1 – процесс получения ацетальдегида; 2 – процесс получения окиси	1	2

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
	Задание комбинированного типа	этилена; 3 – процесс получения пропилена; 4- процесс получения пропаналя		
14.		Выбрать метод получения капролактама ведущими мировыми фирмами: 1 – через фенол; 2 – через анилин; 3 – через циклогексан (окислительная схема); 4 – через толуол; 5 – через нитроциклогексан.	3	2
15.		Какая из стадий получения ализаринового синего красителя является основной: 1 – нитрование; 2 – восстановление; 3 – хинолиновая конденсация; 4 – бисульфирование; 5 – очистка красителя.	3	2
16.	Задание открытого типа	Осуществите кумольный способ производства фенола. Рассмотрите механизм процесса.	Кумольный метод. Основной промышленный способ в мировом производстве фенола был разработан и внедрён в СССР ещё в 1949 г. При каталитическом окислении изопропилбензола (кумола) кислородом воздуха с последующим разложением промежуточных продуктов серной кислотой образуются фенол и ацетон.	10
17.		Осуществите синтез капролактама из: а) бензола, б) фенола. Какими спектральными методами можно подтвердить структуру целевых соединений.	Синтез капролактама из бензола: Синтез капролактама из фенола:	10
18.		Нитрил акриловой кислоты (НАК) используется в качестве мономера для получения синтетических волокон, синтетического каучука и др. Предложите 4 способа получения НАК, которые бы предусматривали ис-		10

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		пользование в качестве исходных соединений следующие продукты: 1. Ацетилен; 2. Окись этилена; 3. Пропилен; 4. Уксусный альдегид.		
19.		Тиофенол применяется в производстве инсектицидов и фунгицидов, является компонентом отдушек в пищевой промышленности и парфюмерии. Предложите синтез тиофенола из бензола. Какими спектральными методами можно подтвердить структуру целевого соединения.		10
20.		Осуществите кумольный способ производства фенола. Рассмотрите механизм процесса. Какими спектральными методами можно подтвердить структуру целевого соединения.	Кумольный метод. Основной промышленный способ в мировом производстве фенола был разработан и внедрён в СССР ещё в 1949 г. При каталитическом окислении изопропилбензола (кумола) кислородом воздуха с последующим разложением промежуточных продуктов серной кислотой образуются фенол и ацетон.	10

Полный комплект оценочных материалов по дисциплине (модулю) (фонд оценочных средств) хранится в электронном виде на кафедре, утверждающей рабочую программу дисциплины (модуля), и в Центре мониторинга и аудита качества обучения.

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности.

1. Валентные и деформационные колебания, характеристические частоты, применение ИК и КР-спектроскопии в химических исследованиях.
2. Электронно-колебательное взаимодействие, эффект Яна-Теллера.
3. Влияние электронно-колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы.
4. Механизмы появления сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР.
5. Дипольный и контактный механизмы СТВ, C-H-фрагмент, расчет констант СТВ с помощью метода МОХ, расщепление на б-протонах, сверхсопряжение, отрицательные спиновые плотности.
6. Проявление движений радикалов и химических реакций в спектрах ЭПР.
7. ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода.
8. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования.

9. Тонкая структура спектров ЯМР. Природа расщеплений в спектрах ЯМР.
10. Физические основы масс- спектрометрического распада.
11. Метастабильные ионы. Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада.
12. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров.
13. Классификация электронных переходов.
14. Интенсивность и положение полос поглощения.
15. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка-Кондона.

Преподаватель, реализующий дисциплину (модуль), в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

Таблица 10 - Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине (модулю)

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий / баллы	Максимальное количество баллов	Срок представления
Основной блок				
1	Представление отчета по теме «Колебательная спектроскопия».	1/5	20	по графику
2	Представление отчета по теме «Радиоспектроскопия. Метод ЭПР».	1/5	20	по графику
3	Представление отчета по теме «Радиоспектроскопия. Метод ЯМР».	/5	20	по графику
4	Представление отчета по теме «Масс-спектрометрия».	1/5	20	по графику
5	Представление отчета по теме «Электронная спектроскопия»	1/5	20	по графику
Всего			100	
Блок бонусов				
7	Активность на занятии		5	
8	Своевременное выполнение всех заданий		5	
Всего			10	-
Дополнительный блок**				
9	Экзамен		10 / 50	
Всего			10 / 50	-
ИТОГО			100	-

Таблица 11 - Система штрафов (для одного занятия)

Показатель	Балл
Опоздание на занятие	-1
Нарушение учебной дисциплины	-1
Неготовность к занятию	-2
Пропуск занятия без уважительной причины	-2

Таблица 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине (модулю)

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90–100	5 (отлично)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
70–74	3 (удовлетворительно)	
65–69		
60–64		
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено

При реализации дисциплины (модуля) в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1. Основная литература:

1. Колосова Т.Ю., Спектральные методы анализа в органической химии: Учебное пособие / Т.Ю. Колосова - Рязань: ООП УИТТиОП, 2017. - 82 с. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента":[сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ryazgmu_001.html (ЭБС «Консультант студента»).

8.2. Дополнительная литература:

2. Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин Физические методы исследования в химии: Учебник для хим. Вузов.- М.: Высшая школа, 2009. – 288 с.

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины

Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех». <https://biblio.asu.edu.ru/> <https://biblio.asu.edu.ru/biblio> <https://biblio.asu.edu.ru/asu> <https://biblio.asu.edu.ru/edu> <https://biblio.asu.edu.ru/ru>
Учетная запись образовательного портала АГУ

Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований.
www.studentlibrary.ru. *Регистрация с компьютеров АГУ*

Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги». <http://www.biblio-online.ru/> <http://www.biblio-online.ru/biblio> <http://www.biblio-online.ru/online> <http://www.biblio-online.ru/ru>

Электронная библиотечная система IPRbooks. <http://www.iprbookshop.ru/> <http://www.iprbookshop.ru/iprbookshop> <http://www.iprbookshop.ru/>

Перечень программного обеспечения:

Наименование программного обеспечения	Назначение
Adobe Reader	Программа для просмотра электронных документов
Moodle	Образовательный портал ФГБОУ ВО «АГУ»
Mozilla FireFox	Браузер
Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013	Пакет офисных программ
7-zip	Архиватор
Microsoft Windows 7 Professional	Операционная система
Kaspersky Endpoint Security	Средство антивирусной защиты
Google Chrome	Браузер
OpenOffice	Пакет офисных программ
Opera	Браузер
Paint .NET	Растровый графический редактор
VLC Player	Медиапроигрыватель

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Занятия проводятся в аудитории, имеющей: Столы – 8 шт. Стулья – 17 шт. Доска – 1 шт. Вытяжной шкаф – 1 шт., компьютеры 10 шт. ИК-спектрофотометр ИКС-29.

При необходимости рабочая программа дисциплины может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе для обучения с применением дистанционных образовательных технологий. Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК).