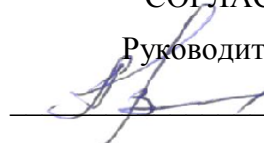


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

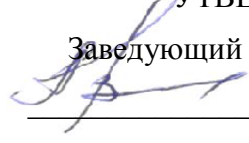
СОГЛАСОВАНО

Руководитель ОПОП


А.В. Великородов
03 июня 2021 г.

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ОНФХ


А.В. Великородов
08 июня 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ

Составители

**Абдурахманова Н.М., доцент кафедры ОНФХ, к.х.н.,
доцент**

Направление подготовки

04.03.01 «ХИМИЯ»

Направленность (профиль) ОПОП

Медицинская и фармацевтическая химия

Квалификация (степень)

бакалавр

Форма обучения

очно-заочная

Год приема (курс)

2020 (2)

Астрахань, 2021 г.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целями освоения дисциплины «Теоретические основы спектральных методов» являются рассмотрение обобщенной теории спектральных методов с позиций взаимодействия излучения с химической частицей на основе квантовой теории. Систематизация общих основ теории спектральных методов призвана способствовать развитию мировоззрения о единстве материи и различных форм ее существования.

1.2. Задачи освоения дисциплины: формирование прочных знаний общих и специфических условий возникновения спектров поглощения и излучения во всем диапазоне энергий электромагнитного излучения (ЭМИ) (от радиоволн до γ - и рентгеновского), химической информации, получаемой из экспериментальных спектров, а также умение предсказать вид ЯМР, ЭПР и оптических спектров заданных химических частиц.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина «Теоретические основы спектральных методов» относится к вариативной части (элективные курсы) блока Б1 учебного плана.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: учебный курс логически связан с теоретическими основами и практическими навыками, полученными при изучении бакалаврами «Неорганической химии», «Аналитической химии», «Физические и физико-химические методы исследования в химии».

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.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: последовательность всех операций, составляющих единую схему атомно-эмиссионного и атомно-абсорбционного спектрального анализа любых проб и образцов; спектральные и аналитические характеристики традиционных и специальных источников света; основные физико-химические процессы, протекающие в источниках света и факторы, влияющие на интенсивность спектральных линий; основные и специализированные методы и оборудование для атомно-эмиссионной и атомно-абсорбционной спектрометрии; современные методы инженерного и научного анализа экспериментальных результатов исследования спектров эрозионной плазмы, разлетающейся в вакуум.

Уметь: работать на приборах, используемых для установления строения и чистоты органических соединений.

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной: «Органическая химия», «Основы органической химии лекарственных веществ», «Органические экотоксиканты», «Катализ в тонком органическом синтезе лекарственных средств». Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компе-

тенций в соответствии с ФГОС 3++ и ОПОП по данному направлению подготовки:

б) общепрофессиональных (ОПК):

ОПК-2 «Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием»

ОПК-3 «Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники».

Таблица 1. Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ОПК-2	Технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	Готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы)	Физико-химическими методами анализа органических соединений
ОПК-3	Строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений	Проводить изучение органических веществ по заданным методикам.	Способами анализа физико-химическими методами органических веществ

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ОПК-2	ИОПК-2.1.1 Технологию работы с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности	ИОПК-2.2.1 Проводить синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик ИОПК-2.4.1 Проводить исследования	ИОПК-2.3.1 Стандартными операциями для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе
ОПК-3	ИОПК-3.1.1 Теоретические и полумпирические модели при решении задач химической направленности	ИОПК-3.2.1 Использовать стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.	ИОПК-3.1.1 Теоретическими и полумпирическими моделями при решении задач химической направленности

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся составляет 2 зачетные единицы (72 часа).

Таблица 2. Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Наименование радела (темы)	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа (в часах)			Самостоят. работа		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Собеседование
				Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
1	Колебательная спектроскопия	3	1,2,3,4	4		4		7	

2	Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	3	5,6,7,8	2		2		7	Собеседование
3	Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	3	9,10,11	4		4		7	Собеседование
4	Масс-спектрометрия	3	12,13,14	4		4		7	Собеседование
5	Электронная спектроскопия.	3	15,16,17,18	4		4		8	Собеседование
	Итого			18		18		36	Зачет

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 тем учебной дисциплины и формируемых в них компетенций

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции		
		ОПК-2	ОПК-3	Σ общее количество компетенций
Колебательная спектроскопия	15	+	+	2
Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	11	+	+	2
Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	15	+	+	2
Масс-спектрометрия	15	+	+	2
Электронная спектроскопия.	16	+	+	2
<i>Итого</i>	72	+	+	2

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-гамма-тонкий, 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 Мак-Коннела. Обмен по двум положениям, медленный и быстрый обмены. Определение скорости обмена из спектров ЭПР. Обмен по многим положениям. Усреднение анизотропных взаимодей-

ствий 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. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

5.1. Указания по организации и проведению лекционных и лабораторных занятий с перечнем учебно-методического обеспечения.

Лекции и лабораторные работы проводятся через неделю в объеме 2 часа. По окончании изучения каждой темы студенты сдают собеседование. По окончании прохождения курса студенты сдают зачет.

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. (31 экз.).

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Таблица 4. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер темы	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1	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.	7	Лекция, лаб. работа
2	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 спин-вого эха, химическая поляризация электронов, лазерный магнитный резонанс.	7	лекция, лаб. работа
3	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.	7	лекция, лаб. работа
4	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. Двух-фокусный секторный масс-спектрометр. Масс-спектрометрия высокого разрешения.	7	лекция лаб. работа
5	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.	8	лекция, лаб. работа

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

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, 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.

Перечень вопросов к зачету

1. Теоретические основы колебательной спектроскопии. Возможности и ограничения метода.
2. Качественный и количественный анализ.
3. Теоретические основы спектроскопии ЭПР. Возможности и ограничения.
4. Теоретические основы спектроскопии ЯМР.
5. Проведение анализа органических соединений методом ЯМР.
6. Теоретические основы масс-спектрометрии.
7. Теоретические основы электронной спектроскопии.
8. Качественный и количественный анализ органических соединений с использованием электронной спектроскопии.

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 2 ч. (все лекции) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

При реализации различных видов учебной работы по дисциплине могут использоваться электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

6.1. Образовательные технологии

Название образовательной технологии	Темы дисциплины	Краткое описание применяемой технологии
Проблемная ситуация	Радиоспектроскопия. Метод ЯМР.	Позволяет оценить умения обучающихся самостоятельно конструировать свои знания в процессе решения практических задач и проблем, исследовательских навыков, навыков практического мышления.

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и off-line (формах: лекций-презентаций, собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных лабораторных работ).

6.2. Информационные технологии

Интернет-ресурсы www.asu.edu.ru (представлены учебно-методические материалы для усвоения студентами курса;

Электронный образовательный ресурс по курсу «Теоретические основы спектральных методов», представленный на платформе moodle по адресу <http://moodle.asu.edu.ru>

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

6.3. Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

- Перечень лицензионного программного обеспечения

Наименование программного обеспечения	Назначение
Adobe Reader	Программа для просмотра электронных документов
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
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
Notepad++	Текстовый редактор
OpenOffice	Пакет офисных программ
Opera	Браузер
Paint .NET	Растровый графический редактор
VLC Player	Медиапроигрыватель
VMware (Player)	Программный продукт виртуализации операционных систем
WinDjView	Программа для просмотра файлов в формате DJV и DjVu

- Перечень современных профессиональных баз данных, информационных справочных систем

1. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем». <https://library.asu.edu.ru>
2. Электронный каталог «Научные журналы АГУ»: <http://journal.asu.edu.ru/>
3. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО "ИВИС". <http://dlib.eastview.com>
Имя пользователя: AstrGU
Пароль: AstrGU
4. Электронно-библиотечная система elibrary. <http://elibrary.ru>
5. 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>
6. Электронные версии периодических изданий, размещенные на сайте информационных ресурсов www.polpred.com
7. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>

- Перечень электронно-библиотечных систем (ЭБС)

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех». <https://biblio.asu.edu.ru>
Учетная запись образовательного портала АГУ
2. 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 содержит более 15 000 наименований изданий.
www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ
3. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги». www.biblio-online.ru, <https://urait.ru/>
4. Электронная библиотечная система IPRbooks. www.iprbookshop.ru

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Паспорт фонда оценочных средств.

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Теоретические основы спектральных методов» 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 5. Соответствие изучаемых разделов, результатов обучения и оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины	Код контролируемой компетенции (компетенций)	Наименование оценочного средства
1	Колебательная спектроскопия	ОПК-2; ОПК-3	Контрольная работа
2	Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	ОПК-2; ОПК-3	Контрольная работа
3	Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	ОПК-2; ОПК-3	Контрольная работа

4	Масс-спектрометрия	ОПК-2; ОПК-3	Контрольная работа
5	Электронная спектроскопия.	ОПК-2; ОПК-3	Контрольная работа

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

Таблица 6. 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 7. Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений

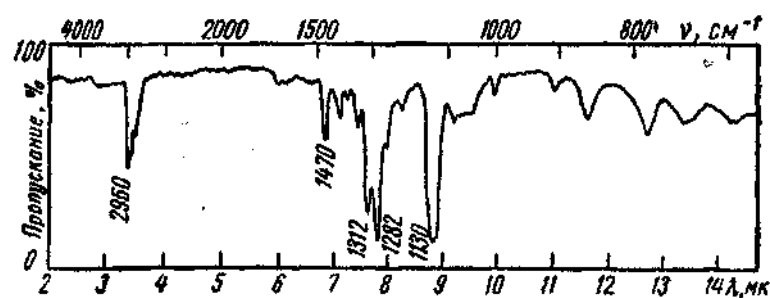
Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять 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.

Контрольная работа №1 «Инфракрасная спектроскопия»

Вариант 1.

1. Определите по ИК-спектру, приведенному на рисунке (жидкая пленка), в какие функциональные группы входят кислород и сера в соединении с брутто-формулой $C_6H_{14}O_2S$.

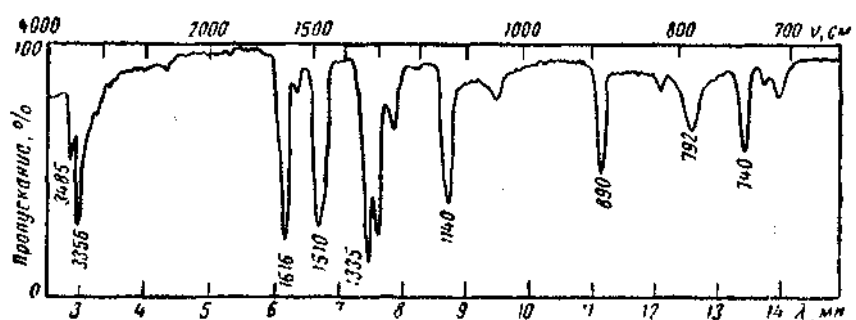


2. Проводя реакцию нитрования бензола, студент при приготовлении нитрующей смеси по ошибке вместо концентрированной серной кислоты использовал фосфорную. ИК-спектр полученного продукта реакции имеет следующие частоты: 3080, 2960, 1600, 1540, 1460, 1345, 1310, 850, 780, 690 (cm^{-1}). На основании спектральных данных определите, удалось ли студенту получить нитробензол. (№11.46)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 2.

1. Соединение с брутто-формулой $\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2\text{N}_2\text{O}_2$ имеет спектр, приведенный на рис. (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.

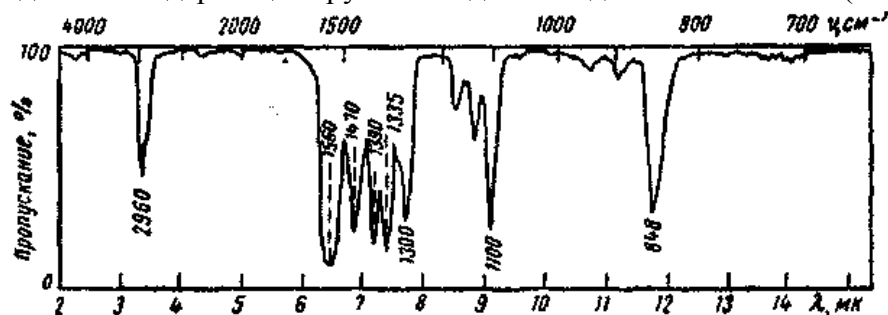


2. Идентифицируйте ароматический углеводород состава C_8H_{10} по его ИК-спектру: 3020, 2930, 2860, 1600, 1500, 1460, 1380, 810 (cm^{-1}). Какие продукты образуются в результате реакций хлорирования этого углеводорода в присутствии хлорида алюминия и при облучении УФ-светом? Напишите схему реакции окисления данного ароматического углеводорода перманганатом калия при нагревании. (11.57)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 3.

1. Какие кислород- и азотсодержащие группы входят в соединение $\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_2\text{N}$ (жидкая пленка)?

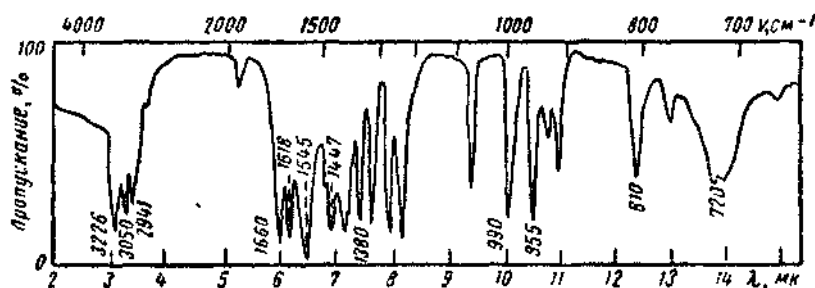


2. Установите строение соединения состава C_9H_{12} , которое при бромировании на свету при нагревании образует преимущественно галогенпроизводное $C_9H_{11}Br$ и имеет ИК-спектр со следующими частотами 3100 см^{-1} , 2900 см^{-1} , 1600 см^{-1} , $1450\text{--}1430\text{ см}^{-1}$, $1340\text{--}1360\text{ см}^{-1}$, 1080 см^{-1} , 1040 см^{-1} , 1020 см^{-1} , 940 см^{-1} , 890 см^{-1} , 750 см^{-1} . (№1333)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 4.

1. Спектр соединения $C_7H_{13}ON$ представлен на рис. (в пластинке КВг). Какие структурные элементы можно определить по спектру?

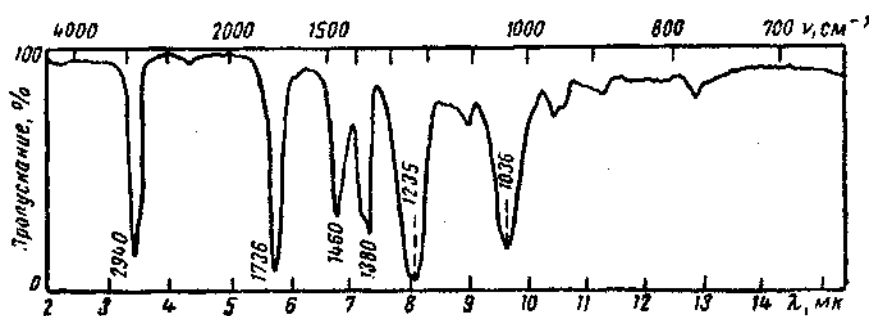


2. Определите строение соединения состава $C_5H_{13}N$, взаимодействующего с хлороводородом, не вступающего в реакции с азотистой кислотой и хлористым ацетилом. В ИК-спектре этого соединения имеются валентные колебания в области $1030\text{--}1230\text{ см}^{-1}$ (дублет). (№605)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 5.

1. В какие функциональные группы входят атомы кислорода в соединении с брутто-формулой $C_8H_{16}O_2$ (жидкая пленка)?

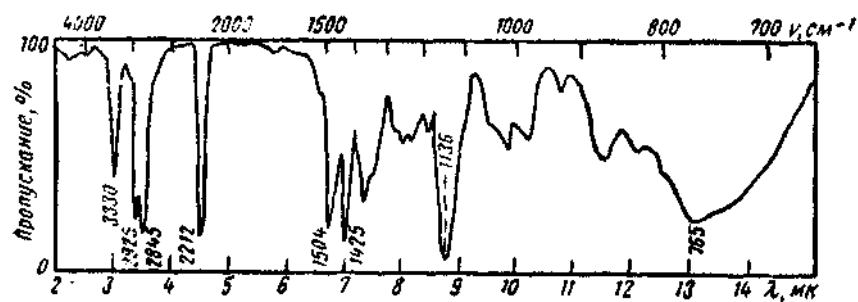


2. Углеводород состава C_8H_6 с аммиачным раствором оксида серебра образует осадок; ИК-спектр углеводорода имеет следующие частоты поглощения: 3400 см^{-1} , 3100 см^{-1} , 2100 см^{-1} , 1500 см^{-1} , 1450 см^{-1} , 1280 см^{-1} , 1185 см^{-1} , 1070 см^{-1} , 1030 см^{-1} , 910 см^{-1} , 760 см^{-1} . (№ 1334)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 6.

1. В какие функциональные группы входят атомы азота в соединении $C_6H_9N_3$, спектр которого приведен на рис. (жидкая пленка)?

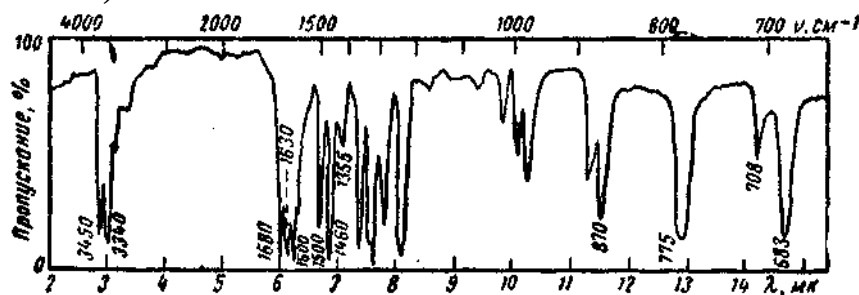


2. Определите строение углеводорода состава C_5H_8 , если известно, что он не реагирует с аммиачным раствором однохлористой меди, при восстановлении образует олефин, озонлизом которого получены уксусный и пропионовый альдегиды. В ИК-спектре углеводорода имеется полоса в области 220 см^{-1} . (№809)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 7.

1. Какие структурные элементы можно определить в соединении C_8H_9ON , спектр которого приведен на рис. (в пластинке KBr)?

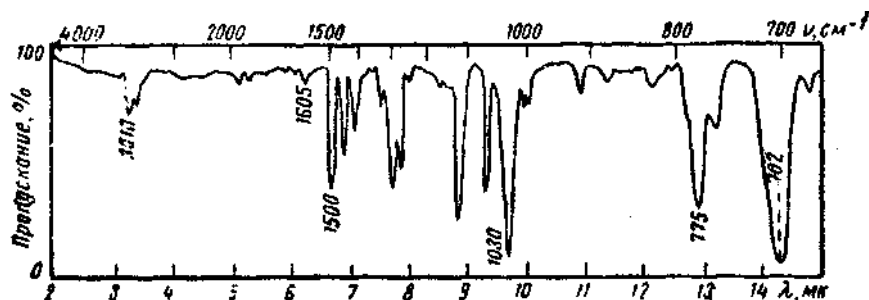


2. Установите строение вещества состава C_6H_{10} , который с аммиачным раствором оксида серебра дает осадок, а в результате гидратации образует кетон. В ИК-спектре углеводорода имеются полосы в области $3300\text{--}3200$ и $2140\text{--}2100\text{ см}^{-1}$. (№810)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 8.

1. Проведите сопоставление полос поглощения в ИК-спектре, приведенном на рис. (в пластинке KBr), со структурой соединения $(C_6H_5CH_2)_2SO$.

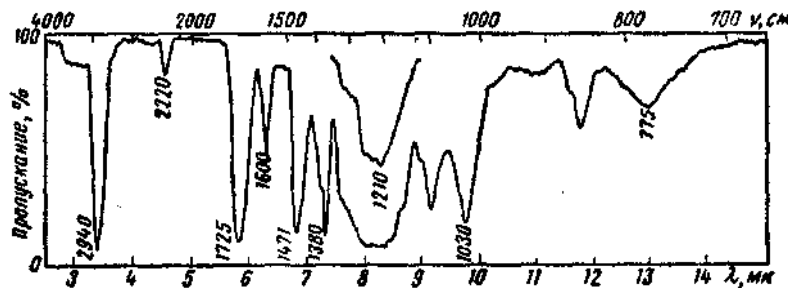


2. Напишите возможные структурные формулы соединения состава $C_5H_{10}O_2$, которое гидролизруется щелочью с образованием метилового спирта, а в ИК-спектре имеется две сильные полосы в области $1050\text{--}1300\text{ см}^{-1}$, а также сильная полоса около 1740 см^{-1} .

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 9.

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

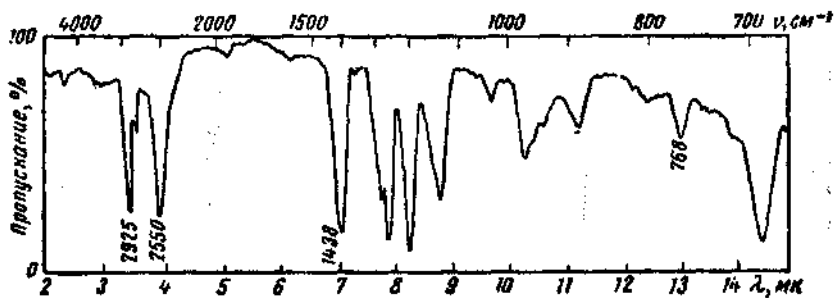


2. Установите строение вещества состава C_3H_4O , образующего осадок с аммиачным раствором оксида серебра, в ИК-спектре вещества имеются полосы 1050, 2130 и $3400-3300\text{ cm}^{-1}$. (№310)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 10.

1. В какие функциональные группы входят атомы серы в соединении $C_2H_6S_2$ (жидкая пленка).

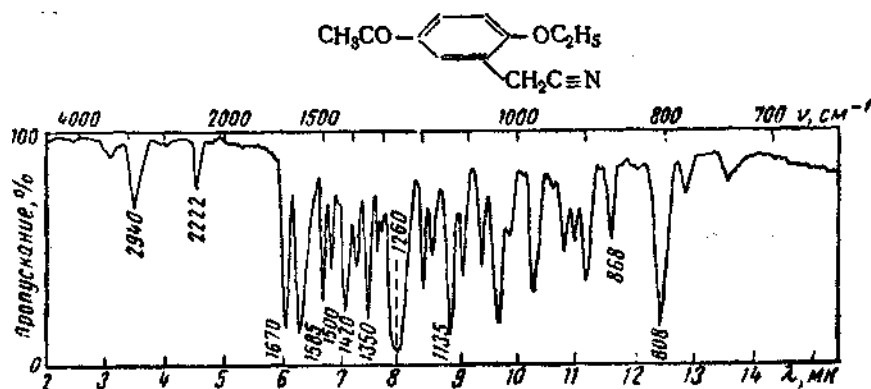


2. Что можно сказать о структуре углеводорода состава C_5H_{10} , который в результате озонлиза образует уксусный и пропионовый альдегиды; в его ИК-спектре имеется сильная полоса в области $970-960\text{ cm}^{-1}$ и средняя в области 1675 cm^{-1} . (№105)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 11.

1. Сопоставьте основные полосы поглощения в ИК-спектре, приведенном на рис., с соответствующими колебаниями групп соединения

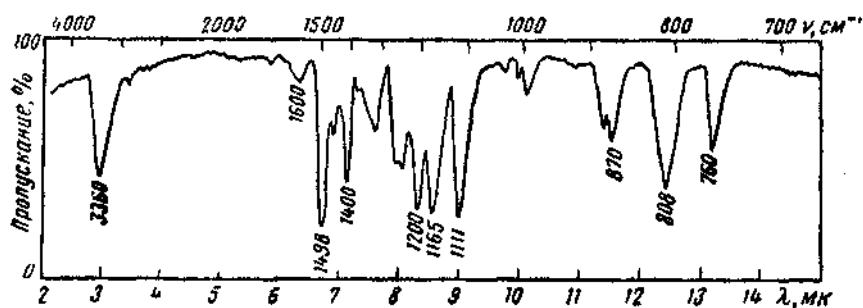


2. Углеводород состава C_8H_6 с аммиачным раствором оксида серебра образует осадок; ИК-спектр углеводорода имеет следующие частоты поглощения: 3400 см^{-1} , 3100 см^{-1} , 2100 см^{-1} , 1500 см^{-1} , 1450 см^{-1} , 1280 см^{-1} , 1185 см^{-1} , 1070 см^{-1} , 1030 см^{-1} , 910 см^{-1} , 760 см^{-1} . (№ 1334)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 12.

1. Какие структурные элементы соединения можно определить по спектру (в пластинке КВг) и брутто-формуле C_7H_7ClO ?

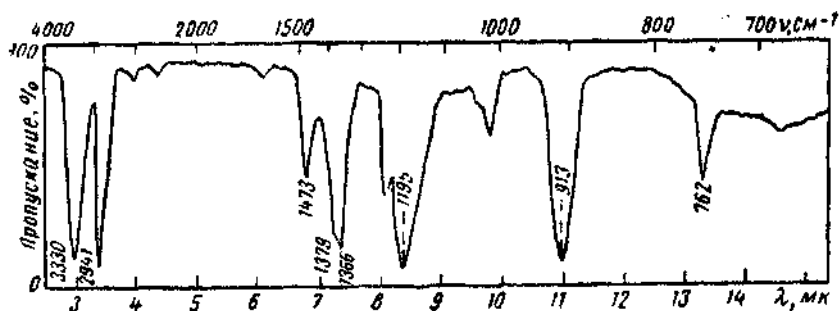


2. Установите строение соединения состава C_9H_{12} , которое при бромировании на свету при нагревании образует преимущественно галогенпроизводное $C_9H_{11}Br$ и имеет ИК-спектр со следующими частотами 3100 см^{-1} , 2900 см^{-1} , 1600 см^{-1} , $1450\text{--}1430\text{ см}^{-1}$, $1340\text{--}1360\text{ см}^{-1}$, 1080 см^{-1} , 1040 см^{-1} , 1020 см^{-1} , 940 см^{-1} , 890 см^{-1} , 750 см^{-1} . (№1333)

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 13.

1. По ИК-спектру (жидкая пленка) и брутто-формуле $C_4H_{10}O$ выскажите предположение о структуре соединения.

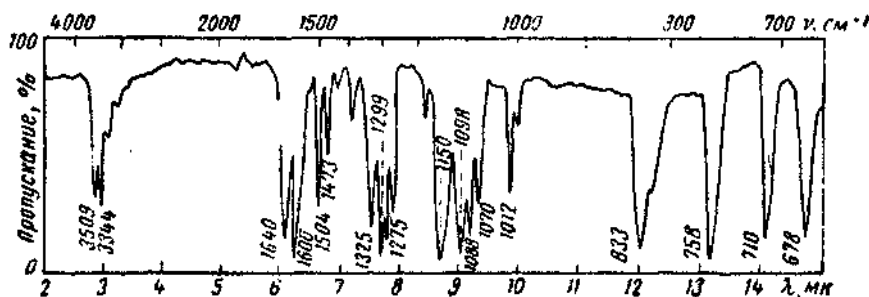


2. Идентифицируйте ароматический углеводород состава C_8H_{10} по его ИК-спектру: 3020, 2930, 2860, 1600, 1500, 1460, 1380, 810 (cm^{-1}). Какие продукты образуются в результате реакций хлорирования этого углеводорода в присутствии хлорида алюминия и при облучении УФ-светом? Напишите схему реакции окисления данного ароматического углеводорода перманганатом калия при нагревании. (11.57)

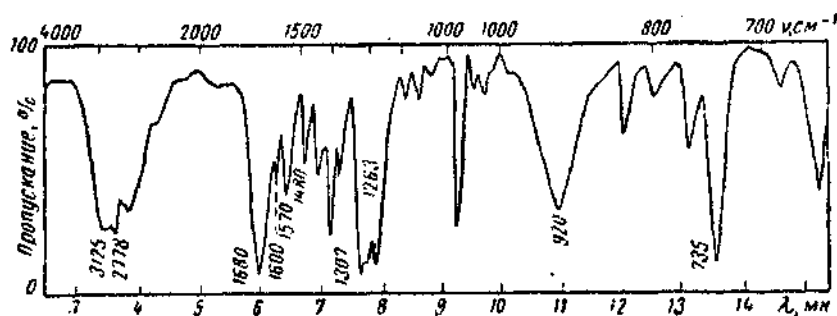
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 14.

1. Какие кислород-, азот- и серусодержащие группы имеются в соединении $C_{12}H_{10}ClO_2NS$ (жидкая пленка)?



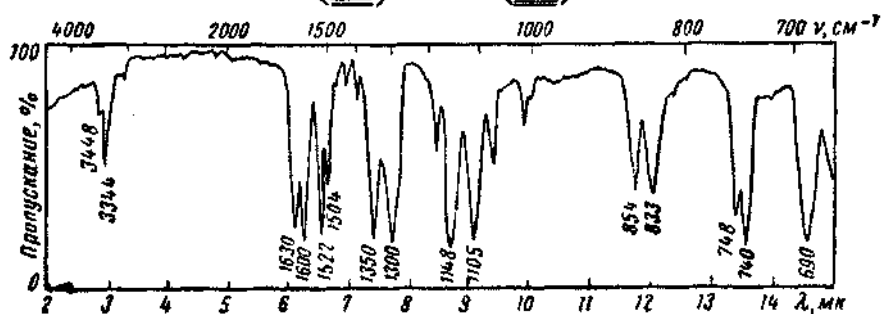
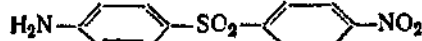
2. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_8O_2$?



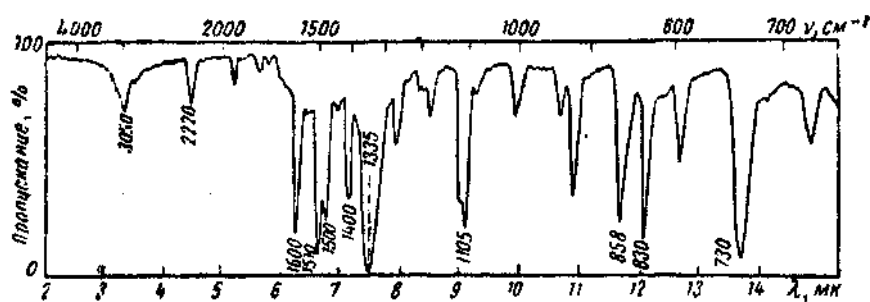
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 15.

1. Сопоставьте полосы поглощения (в пластинке KBr) со структурой соединения



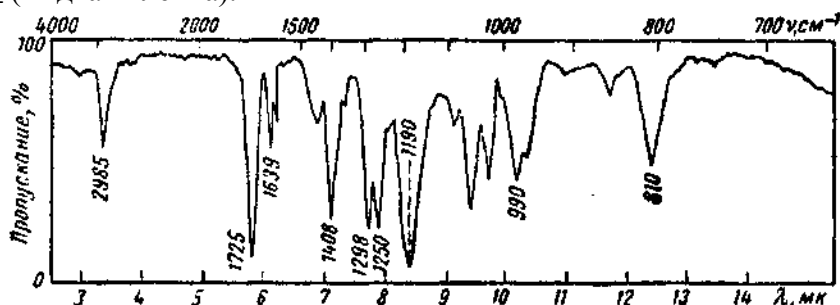
2. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_6O_2N_2$ (в пластинке KBr)?



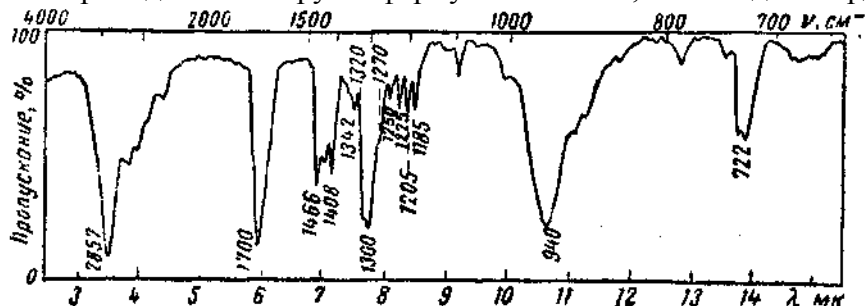
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант № 16.

1. Выскажите предположение о структуре соединения по приведенному ИК-спектру и брутто-формуле $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$ (жидкая пленка).



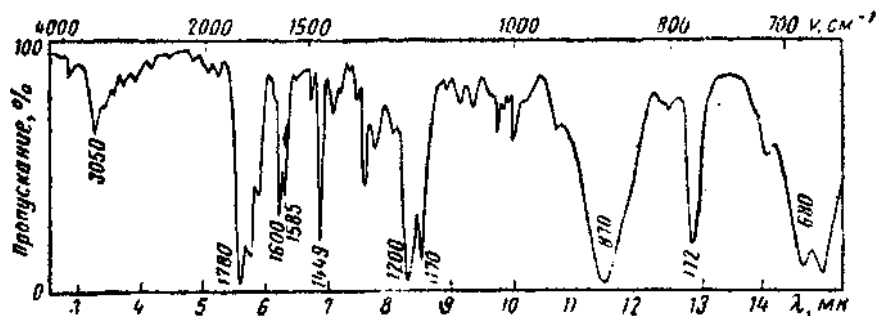
2. Объясните спектр соединения с брутто-формулой $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$, снятый для твердого соединения.



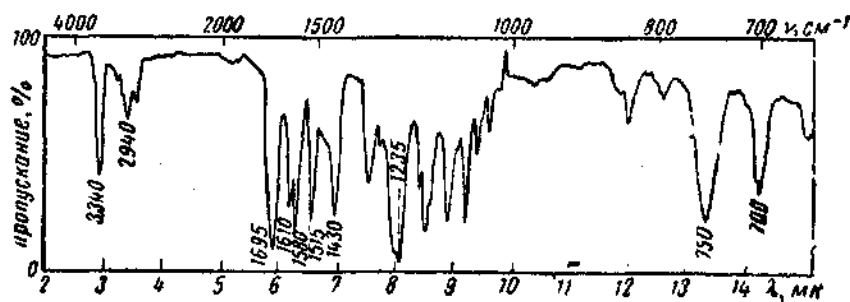
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант № 17.

1. К какому типу соединений относится вещество $\text{C}_7\text{H}_5\text{OCl}$, спектр которого показан на рис. (жидкая пленка)?



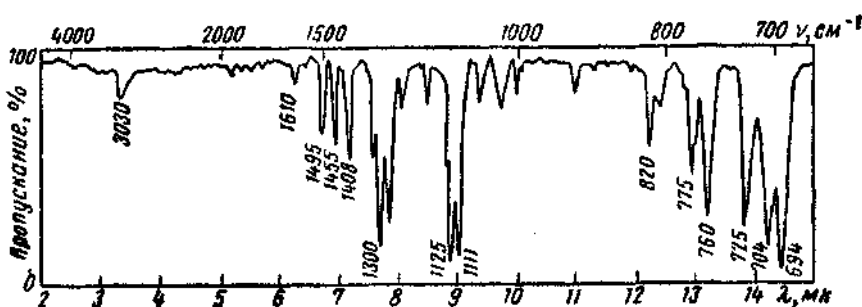
2. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{O}_2\text{N}$ (жидкая пленка)?



3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 18.

1. Сопоставьте основные полосы поглощения ИК-спектра (в пластинке KBr) со структурой соединения ($C_6H_5CH_2$)₂SO₂.



2. В результате взаимодействия 1-бромбутана с аммиаком получены два соединения, при ацелировании которых уксусным ангидридом соответственно образуются соединения А и Б. На основании ИК-спектров веществ А (3310, 2960, 2865, 1650, 1550 1420, 1370 cm^{-1}) и Б (2960, 2865, 1650, 1415, 1370 cm^{-1}) установите их строение. Напишите схемы приведенных реакций.

3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Контрольная работа №2

Вариант 1.

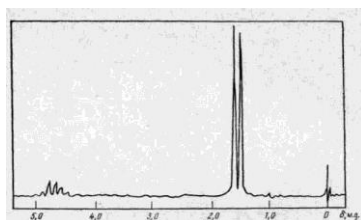
1. Укажите как на основании спектров ПМР бензола, толуола и *n*-ксилола (1,4-диметилбензола) различить эти углеводороды.
2. Спин-спиновое взаимодействие.

Вариант 2.

1. С помощью спектроскопии ПМР докажете, что в результате взаимодействия ацетилхлорида CH_3COCl с метанолом образовался метилацетат. Как определить при этом в продукте количество возможных примесей – непрореагировавшего ацетилхлорида и побочно образующейся уксусной кислоты.
2. Химический сдвиг.

Вариант 3.

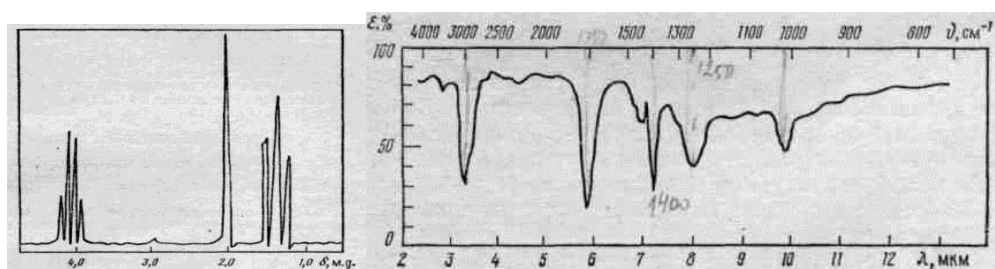
1. Определите строение соединения $C_3H_7O_2N$ по ПМР-спектру, представленному на рисунке



2. Принцип устройства спектрометра ЯМР.

Вариант 4.

1. Определите строение вещества с молекулярной формулой $C_4H_8O_2$, в результате нагревания которого с разбавленной кислотой образуются два вещества с формулами C_2H_6O и $C_2H_4O_2$. Первое при взаимодействии с металлическим натрием выделяет водород, а второе окрашивает раствор метилового оранжевого в красный цвет и с $NaOH$ образует вещество $C_2H_3O_2Na$. ПМР- и ИК-спектры исходного соединения представлены на рисунках:



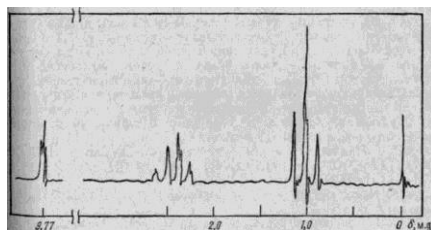
2. Зависимость химического сдвига от индукционного эффекта.

Вариант 5.

1. Установите строение ароматического углеводорода состава C_8H_{10} , в ПМР-спектре которого имеются сигналы при 2,1 м.д. и 7,1 м.д. (относительно ТМС); при окислении углеводорода получается бензолдикарбоновая кислота, а при нитровании – только одно мононитропроизводное.
2. Влияние внутренних факторов на химический сдвиг.

Вариант 6.

1. На рисунке представлен ПМР-спектр (относительно ТМС) соединения состава C_3H_8O . Определите строение соединения и проведите отнесение каждой группы линий спектра.



2. Влияние температуры концентрации и растворителя на резонансные сигналы.

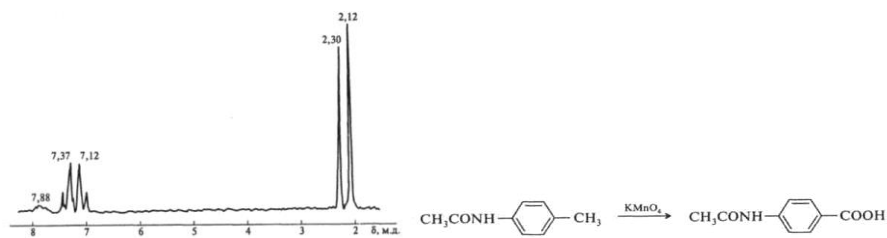
Вариант 7.

1. В ИК-спектре вещества состава $C_5H_{10}O$ имеется полоса при 1715 см^{-1} ; в ПМР-спектре (ПМР-спектр подтверждает отсутствие ароматических или олефиновых протонов) имеется триплет в области 1 м.д. и квадруплет в области 3,5 м.д. (относительно ТМС); вещество образует оксим, присоединяет синильную кислоту и не реагирует с гидросульфитом натрия. Определите строение исследуемого соединения.
2. Принцип устройства спектрометра ЯМР.

Контрольная работа №3

Вариант 1.

1. Покажите, какие сигналы должны наблюдаться в спектре ПМР *n*-ацетамидобензойной кислоты. Чем будет отличаться этот спектр от спектра ПМР исходного *n*-метилацетанил.



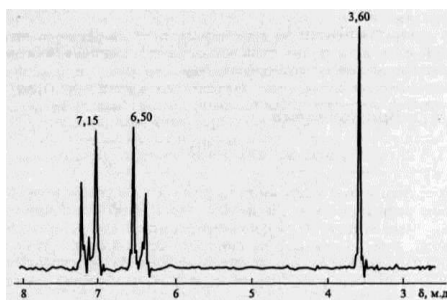
2. Зависимость резонансной частоты от структуры.

Вариант 2.

1. В спектре ПМР бензойной кислоты имеются два сигнала: мультиплет (7,4-8,1 м.д.) и синглет (12,8 м.д.) Чем обусловлена мультиплетность сигнала в более сильном поле?
2. Спин-спиновое взаимодействие.

Вариант 3.

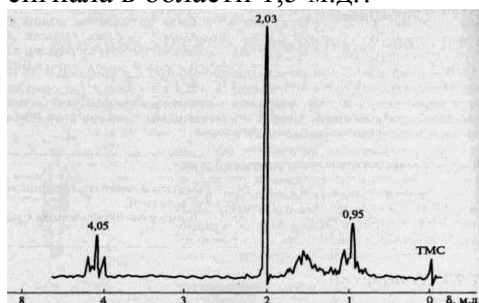
1. Сделайте соотнесение сигналов в спектре ПМР *n*-броманилина. Можно ли на основании этого спектра сделать вывод о полноте удаления ацетильной группы?



2. Влияние температуры концентрации и растворителя на резонансные сигналы.

Вариант 4.

1. Для каких сигналов в спектре ПМР бутилацетата можно сделать надежное отнесение? Чем обусловлена мультиплетность сигнала в области 1,5 м.д.?

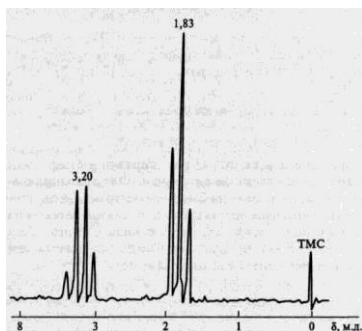


2. Влияние внутренних факторов на химический сдвиг.

3.

Вариант 5.

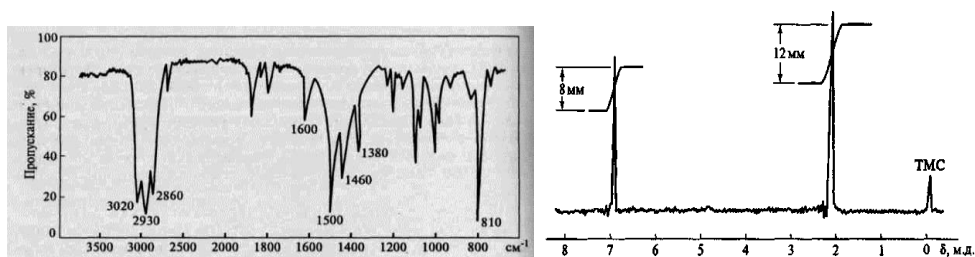
1. Спектр ПМР полученного иодэтана приведен на рисунке. Определите, является ли продукт реакции чистым или он содержит примесь исходного этанола.



2. Влияние индуцированных магнитных моментов соседних атомов и групп.

Вариант 6.

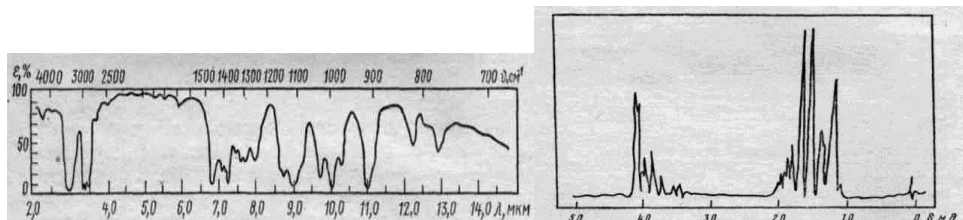
1. Идентифицируйте ароматический углеводород состава C_8H_{10} по его ИК- и ПМР-спектрам.



2. Зависимость химического сдвига от индукционного эффекта.

Вариант 7.

1. Определите строение соединения состава $C_4H_{10}O$ по ИК- и ПМР-спектрам, представленным на рисунках:



2. Влияние внутренних факторов на химический сдвиг.

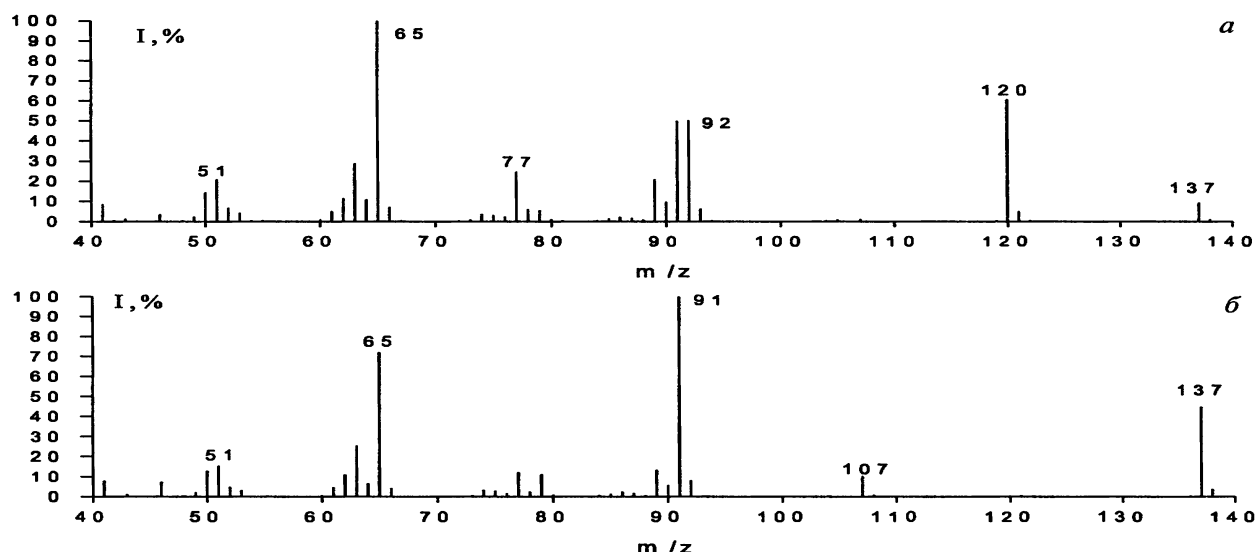
Вариант 8.

1. В спектре ПМР исходного ацетанилида ароматические протоны обнаруживаются в виде сложного мультиплета (7,0 – 7,7 м.д.). Как изменится эта область спектра в результате введения в *пара*-положение нитрогруппы? Предскажите область химических сдвигов протонов групп CH_3 и NH и мультиплетность этих сигналов.

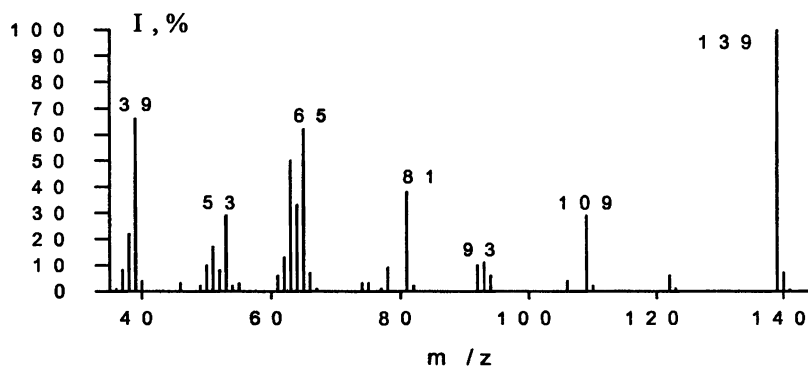
Контрольная работа №4

Вариант 1.

1. На рисунке представлены масс-спектры *о*- и *п*-нитротолуолов. Сделайте отнесение и объясните образование фрагментарных ионов, характеризующихся наиболее интенсивными пиками.

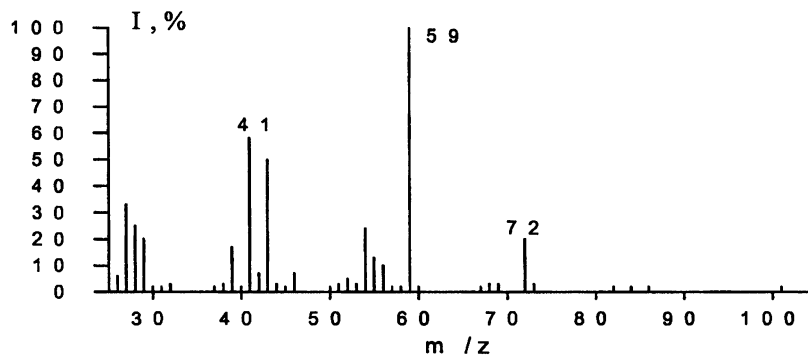


2. Объясните образование ионов с m/z 122, 109, 94, 93, 81, 65 и составьте схему распада M^{+} о-аминофенола

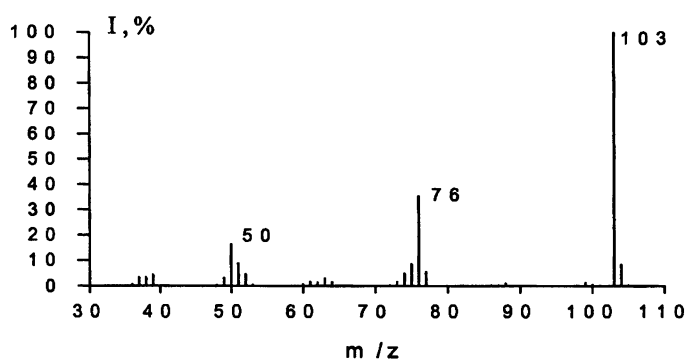


Вариант 2

1. Объясните образование ионов, характеризующихся наиболее интенсивными пиками, при распаде M^{+} оксима пентаналь. Составьте схему фрагментации.



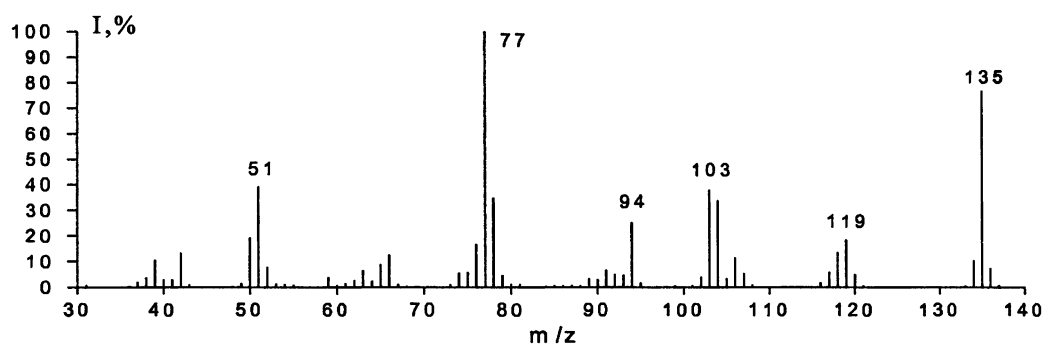
2. Идентифицируйте соединение по спектру электронного удара



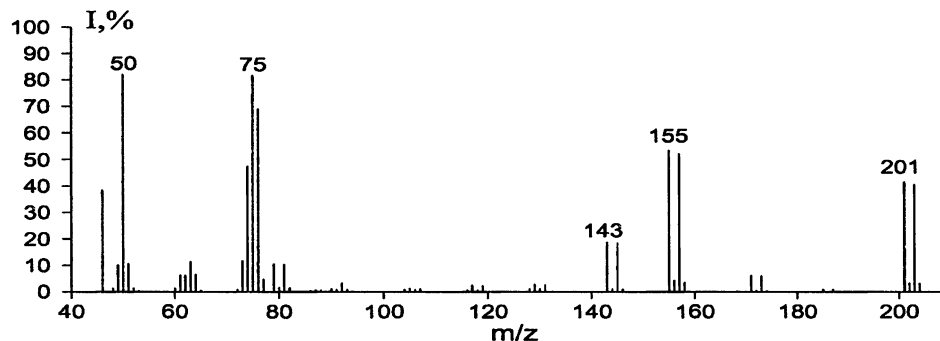
m/z	I, %	m/z	I, %
27	1,67	64	1,53
37	3,28	73	1,75
38	3,26	74	4,95
39	4,30	75	8,60
49	3,11	76	35,3
50	16,2	77	5,55
51	8,85	88	1,01
52	4,75	99	1,42
61	1,58	103	100
62	1,53	104	8,18
63	2,97	105	0,24

Вариант 3.

1. Объясните образование ионов, характеризующихся наиболее интенсивными пиками, при распаде M^+ оксима ацетофенона. Составьте схему фрагментации



2. Идентифицируйте соединение по спектру электронного удара



m/z	I, %	m/z	I, %	m/z	I, %	m/z	I, %
46	38,4	74	47,5	105	1,20	145	18,3
48	1,30	75	81,5	106	0,90	155	53,4
49	10,2	76	69,0	107	1,10	156	4,30
50	82,0	77	4,70	117	2,40	157	52,2
51	10,6	79	10,5	119	2,20	158	3,50
52	1,40	80	1,60	128	1,10	171	6,10
61	6,30	81	10,4	129	2,70	173	5,90
62	6,10	82	1,50	130	1,20	201	41,6
63	11,4	90	1,20	131	2,60	202	3,30
64	6,40	92	3,30	143	18,7	203	40,6
73	11,7	93	1,03	144	1,20	204	3,10

ТЕСТЫ по дисциплине «Спектральные методы анализа органических соединений»

ТЕМА 1: ИНФРАКРАСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

1. Какие органические растворители применяют в ИК-спектроскопии: а/ толуол; б/ бензол; в/ четыреххлористый углерод; г/ ацетон;

2. ДЕФОРМАЦИОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ОБУСЛОВЛЕННЫ:

а/ изменением углов между связями;

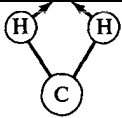
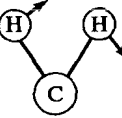
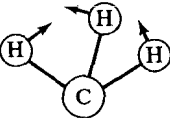
б/ изменением длины связей;

в/ переходом электронов с низшей занятой молекулярной орбитали на высшую свободную молекулярную орбиталь;

г/ экранированием валентными электронами соседних атомов при действии внешнего магнитного поля;

д/ ионизацией нейтральных молекул.

3. На каком из рисунков показаны симметричные деформационные колебания:

А	
Б	
В	

4. Резонанс Ферми это:

а/ взаимодействие двух соседних связей близких по энергии;

б/ механическое взаимодействие связей между собой, влияющие друг на друга;

в/ взаимодействие между обертонами и соответствующими основными колебаниями

5. Характеристическими частотами называют:

а/ частоты поглощения связей, в которых принимает участие атом водорода;

б/ частоты поглощения атомов только в функциональных группах OH-, NH₂, CH₃, C=O, SO₂;

в/ частоты поглощения групп атомов, содержащие только двойные связи;

г/ частоты поглощения группы атомов, мало изменяющиеся при переходе от одного соединения к другому, не зависимо от строения молекулы;

6. Какие характеристические частоты в ИК-спектре можно использовать для контроля за протеканием реакции:

а/ по постепенному исчезновению полосы карбонильной группы C=O – 1730-1717 см⁻¹, а также по возрастанию полосы поглощения аминогруппы – 1360-1280 см⁻¹;

б/ по исчезновению полосы поглощения связи C-N – 1220-1020 см⁻¹, и возникновению полосы поглощения цианогруппы – 2260 см⁻¹.

в/ по постепенному исчезновению двух полос поглощения аминогруппы NH₂ – 3350-3170 см⁻¹ и полосы карбонильной группы 1640 см⁻¹, а также по возрастанию полосы поглощения цианогруппы в нитриле – 2260 см⁻¹;

7. По каким характеристическим частотам можно определить пропионовую кислоту:

а/ валентные C-H – 2962-2926 см⁻¹, 2872-2853 см⁻¹ (асимметричные, симметричные), деформационные C-H – 1485-1430 см⁻¹, 1380-1340 см⁻¹ (асимметричные, симметричные)

б/ свободные валентные O-H 3650-3580 см⁻¹;

в/ валентные C=O – 1740-1680 см⁻¹.

г/ валентные связанные ОН – 2700-2500 см^{-1} , валентные С=О алифатические 1725-1700 см^{-1} ;

8. ЧТО ТАКОЕ ОБЛАСТЬ «ОТПЕЧАТКОВ ПАЛЬЦЕВ»?

А/ ОБЛАСТЬ НИЖЕ 1300 см^{-1}

Б/ ОБЛАСТЬ ВЫШЕ 1400 см^{-1}

В/ ОБЛАСТЬ ОТ 2200 ДО 1000 см^{-1}

Г/ ОБЛАСТЬ ОТ 1900 ДО 1300 см^{-1}

9. В каких областях спектра поглощает вазелиновое масло:

а/ 3500-3400, 1650 см^{-1} ;

б/ 1750-1650, 960 см^{-1} ;

г/ 2900-2800, 1460, 1380 см^{-1} ;

д/ 1550, 1380, 1270 см^{-1}

ТЕМА 2: ЯДЕРНО-МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

10. ЧТО ЛЕЖИТ В ОСНОВЕ СПЕКТРОСКОПИИ ЯДЕРНО-МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА:

А/ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ;

Б/ ИОНИЗАЦИЯ НЕЙТРАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ;

В/ ВОЗБУЖДЕНИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ;

Г/ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АТОМНОГО ЯДРА;

11. Химическим сдвигом называется:

а/ отклонение от характеристической частоты;

б/ возрастание экранирования;

в/ разность между резонансными частотами определенного сигнала и сигнала какого-либо стандартного вещества

12. В результате чего протоны ароматических соединений резонируют в областях слабого поля:

а/ взаимодействия протонов с π -электронами двойной связи;

б/ сопряженной π -электронной системы

в/ кольцевого тока;

13. Как взаимосвязаны кислотные свойства соединений со значениями химического сдвига:

а/ с ослаблением кислотных свойств, значения химического сдвига увеличиваются;

б/ с ослаблением кислотных свойств, значения химического сдвига не изменяются;

в/ кислотные свойства не влияют на значения химического сдвига.

г/ с ослаблением кислотных свойств, значения химического сдвига уменьшаются;

14. Влияние на магнитное экранирование протона другого неэквивалентного протона через валентные электроны называется:

а/ электронным взаимодействием;

б/ протонным взаимодействием;

в/ спин-спиновым взаимодействием

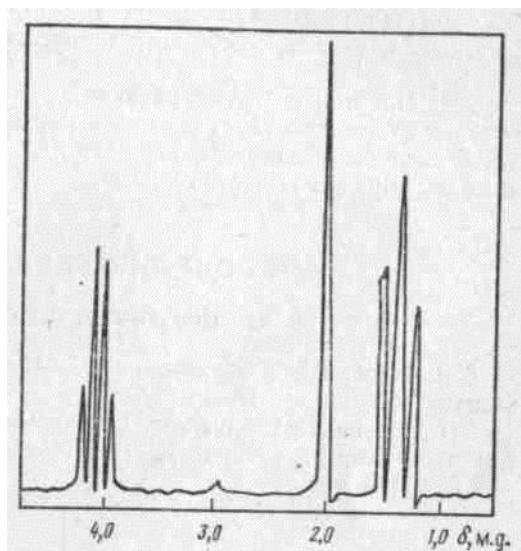
15. Экранирование протонов алифатических связей С-Н в ряду CH_3 ; CH_2 ; CH :

а/ увеличивается;

б/ остается неизменной;

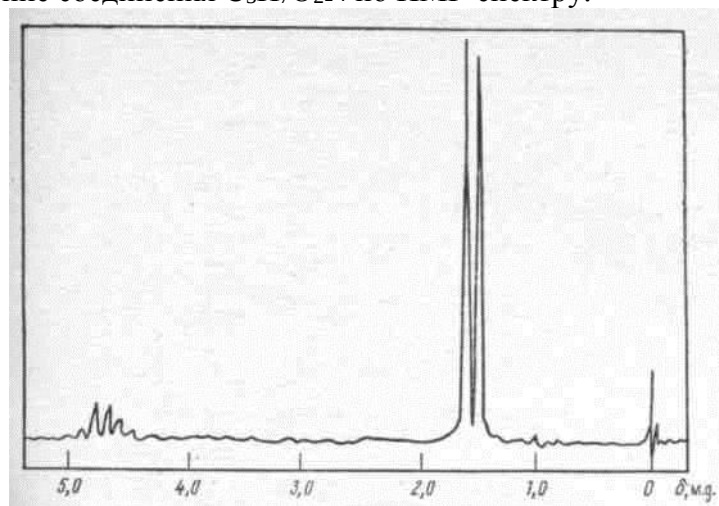
в/ уменьшается

16. Определите, какому веществу принадлежит спектр ПМР, если молекулярная формула его $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$. В результате нагревания его с разбавленной кислотой образуются два вещества с формулами $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ и $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$. Первое при взаимодействии с металлическим натрием выделяет водород, а второе окрашивает раствор метилового оранжевого в красный цвет и с NaOH образует вещество $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2\text{Na}$.



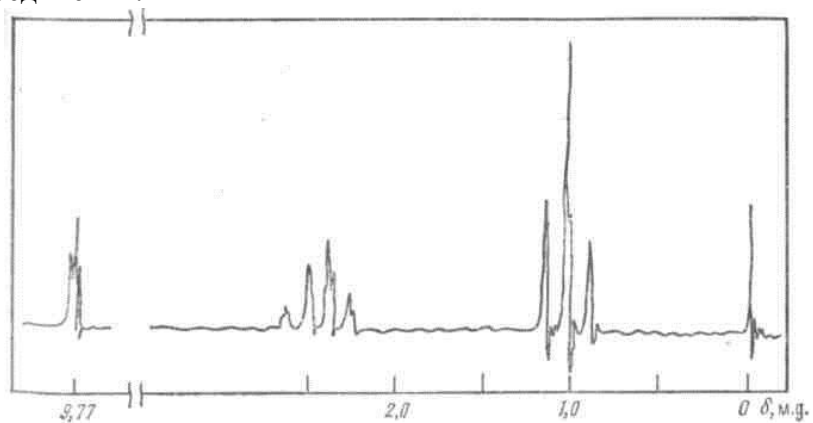
- а/ уксусная кислота;
- б/ этилацетат;
- в/ метилацетат;
- г/ пропионовый альдегид

17. Определите строение соединения $C_3H_7O_2N$ по ПМР-спектру:



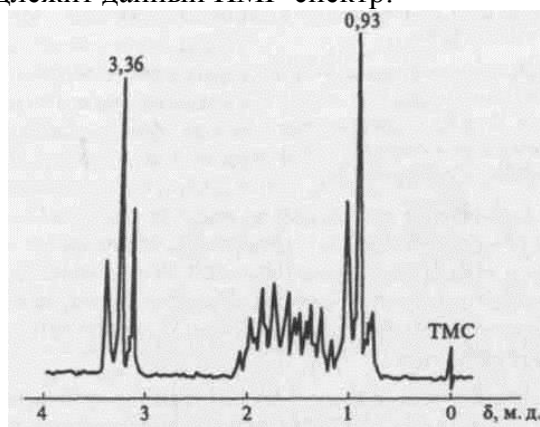
- а/ 1-нитропропан;
- б/ 2-аминопропан;
- в/ 2-аминобутан.
- г/ 2-нитропропан;

18. На рисунке представлен ПМР-спектр (относительно ТМС) соединения состава C_3H_6O . определите строение соединения:



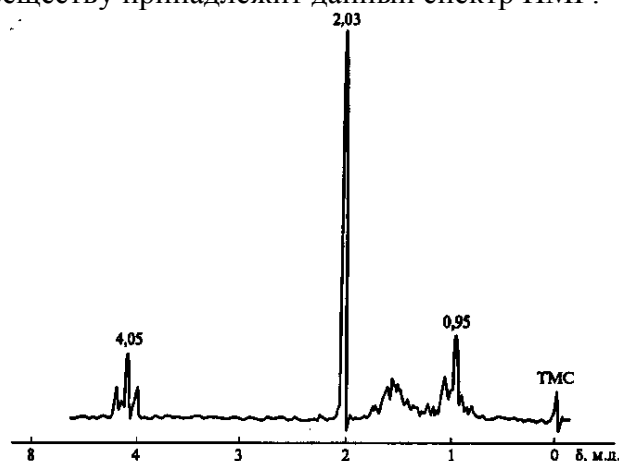
- а/ бутаналь;
- б/ пропионовый альдегид;
- в/ бензол;
- г/ гексан.

19. Какому веществу принадлежит данный ПМР-спектр:



- а/ 2-нитробутан;
- б/ 2-аминопентан;
- в/ 1-бромбутан;
- г/ хлорпентан.

20. Определите, какому веществу принадлежит данный спектр ПМР:



- а/ бензальдегид;
- б/ пентен;
- в/ бутилацетат;
- г/ ацетилен.

ТЕМА 3: МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

21. Метод масс-спектрометрии основан на:

- а/ регистрации ионов, возникающих при возбуждении электронов;
- б/ регистрации ионов, возникающих при поглощении веществом электромагнитного излучения;
- в/ регистрации ионов, возникающих магнитных колебаниях атомного ядра;
- г/ регистрации ионов, возникающих при ионизации нейтральных молекул.

22. Что происходит при бомбардировке электронами с высокой энергией паров вещества при давлении 10^{-5} - 10^{-8} мм рт.ст.:

- а/ ионизация;

- б/ протонизация;
- в/ циклизация;
- г/ полимеризация.

23. Молекулярным ионом называют:

- а/ возбужденный катион, образующийся в результате диссоциации;
- б/ возбужденный анион-радикал, образующийся при принятии молекулой электрона под воздействием внешней энергии;
- в/ возбужденный ион, расположенный в магнитном поле;
- г/ возбужденный катион-радикал, образующийся при потере молекулой электрона под воздействием электронного удара.

24. В чем заключается преимущество масс-спектрометрии:

- а/ специфичностью и низким пределом обнаружения;
- б/ быстротой и точностью определения структуры вещества;
- в/ простотой проведения анализа;
- г/ высокая информативность по сравнению с другими методами.

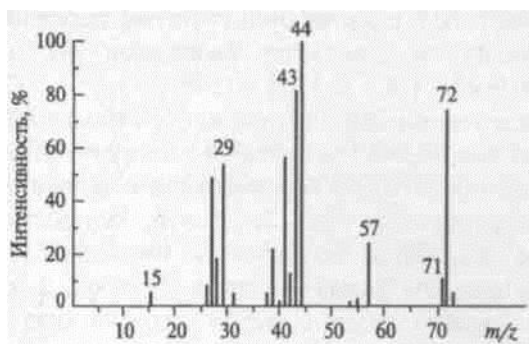
25. В чем суть «азотного правила»?

- а/ молекула с нечетной молекулярной массой содержит атома азота, либо содержит нечетное число атомов азота;
- б/ молекула с четной молекулярной массой либо содержит атома азота, либо содержит четное число атомов азота;
- г/ молекула с четной молекулярной массой либо не содержит атома азота, либо содержит нечетное число атомов азота;
- д/ молекула с четной молекулярной массой либо не содержит атома азота, либо содержит четное число атомов азота.

26. «Чётно-электронное» правило заключается в следующем:

- а/ ион-радикалы (нечётное количество электронов) могут элиминировать, или радикалы, или четно-электронные нейтральные молекулы, тогда как ионы (чётное число электронов) могут терять лишь нейтральные чётно-электронные частицы, но не радикалы;
- б/ катион-радикалы (нечетное количество электронов) могут элиминировать, или радикалы, или четно-электронные нейтральные молекулы, тогда как ионы (четное число электронов) могут терять лишь положительно заряженные электронные частицы;
- в/ анион-радикалы (нечетное количество электронов) могут элиминировать, или четно-электронные нейтральные молекулы, тогда как ионы могут терять лишь нейтральные четно-электронные частицы, но не радикалы;
- г/ катион-радикалы или радикалы, или четно-электронные нейтральные молекулы, тогда как ионы (четное число электронов) могут терять лишь нейтральные четно-электронные частицы, но не радикалы

27. Определите формулу вещества по масс-спектру, если его брутто-формула C_4H_8O :



- а/ бензойная кислота;
- б/ бутанон;
- в/ бутанол.
- г/ бутаналь;

28. В чем заключается перегруппировка Мак-Лафферти:

- а/ миграция атома водорода через четырехчленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы;
- б/ миграция атома водорода через шестичленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы;
- в/ выброс нейтральной молекулы при участии атомов водорода из различных положений;
- г/ миграция атома водорода через шестичленное переходное состояние, сопровождающаяся выделением нейтральной молекулы.

29. Определите элементный состав соединения, исходя из интенсивностей изотопных пиков молекулярного иона: 108 (100%), 109 (7,85%) и 110 (0,45%):

- а/ $C_7H_6O_2$;
- б/ C_6H_{12} ;
- в/ C_4H_4N ;
- г/ C_7H_8O .

30. Определите формулу вещества, спектр которого содержит следующие значения m/z : 46, 45, 31, 29, 15.

- а/ этанол;
- б/ пропаналь;
- в/ изопропил;
- г/ метилсалицилат.

31. О чем можно судить по интенсивности пиков масс-спектров:

- а/ о химическом состоянии изучаемых атомов;
- б/ о количестве атомов данного элемента;
- в/ о химических свойствах изучаемых атомов;
- г/ о структуре вещества.

ТЕМА 4: ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

32. Что представляет собой молярный коэффициент погашения:

- а/ оптическую плотность одномолярного вещества при толщине слоя 1 см;
- б/ оптическую плотность вещества при толщине слоя 0,5 см;
- в/ оптическую плотность одномолярного вещества;
- г/ оптическую плотность двумолярного вещества при толщине слоя 0,5 см.

33. Какие типы электронных переходов возможны в электронной спектроскопии:

- а/ $n \rightarrow \pi^*$
- б/ $n \rightarrow \sigma^*$
- в/ $\sigma^* \rightarrow n$
- г/ $\sigma \rightarrow \sigma^*$

34. Какие переходы обусловлены неподеленными электронными парами:

- а/ $n \rightarrow \sigma^*$
- б/ $n \rightarrow \pi^*$
- в/ $\sigma \rightarrow \sigma^*$
- г/ $\sigma^* \rightarrow n$

35. Что такое хромофоры?

- а/ молекулы, в которых осуществляется $\sigma^* \rightarrow n$ переход;
- б/ неподеленные электронные пары;
- в/ только кратные связи.
- г/ структурные группы (кратные связи, ароматические фрагменты), обуславливающие избирательное поглощение УФ-света;

37. Почему спектр дифенила, замещенного в *орто*-положении метильной группой, аналогичен спектру соответствующего моноциклического производного бензола:

- а/ заместитель затрудняет сопряжение между двумя кольцевыми системами;
- б/ заместитель не влияет на спектр;
- г/ заместитель индуцирует меньший гипсохромный эффект;
- д/ заместитель облегчает сопряжение между кольцевыми системами.

38. Спектры ароматических гетероциклических соединений с шестью π -электронами определяются:

- а/ характером сопряжения ароматической системы;
- б/ характером взаимодействия σ - и π -электронов;
- в/ характером влияния гетероатома;
- г/ характером резонанса в молекуле.

39. Группировки, способствующие делокализации π -электронной системы полициклических ароматических углеводородов, индуцируют:

- а/ дополнительный батохромный эффект;
- б/ гипсохромный эффект;
- в/ батохромный эффект;
- г/ дополнительный гипсохромный эффект.

40. Для чего тыльную поверхность призмы в УФ-спектрометрах покрывают серебром:

- а/ усиливает интерференцию;
- б/ устраняет дисперсию излучения;
- в/ устраняет излишнее поглощение света;
- г/ устраняет возможность интерференции.

41. Электронный спектр изображают в виде:

- а/ графика зависимости концентрации C от длины волны λ ;
- б/ графика зависимости пропускания $I_g(I_0/I)$ от концентрации C ;
- в/ графика зависимости пропускания $I_g(I_0/I)$ от длины волны λ ;
- г/ графика зависимости молярного коэффициента поглощения ϵ от длины волны λ .

42. Наибольшие изменения в спектрах дизамещенных бензолов наблюдаются для соединений, содержащих:

- а/ одновременно электроно-донорные и электроно-акцепторные заместители;

<i>Второй этап (уровень)</i> Способность проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	Владеть (ВП ОПК-2): Физико-химическими методами анализа органических соединений	Не владеет	Ограниченно владеет физико-химическими методами анализа органических соединений	Удовлетворительно владеет физико-химическими методами анализа органических соединений	Хорошо владеет физико-химическими методами анализа органических соединений	Отлично владеет физико-химическими методами анализа органических соединений
	Уметь (УП ОПК-2): Готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы)	Не умеет	Ограниченно умеет готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы)	Удовлетворительно умеет готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы)	Хорошо умеет готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы)	Отлично умеет готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы)
	Знать (ЗП ОПК-2): Технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	Не знает	Ограниченно знает технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	Удовлетворительно знает технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	Хорошо знает технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	Отлично знает технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности
(ОПК-3) «Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники»						
(ОПК-3) «Способность применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и про-	Владеть (ВП ОПК-3): Способами анализа физико-химическими методами органических веществ	Не владеет	Ограниченно владеет способами анализа физико-химическими методами	Удовлетворительно владеет способами анализа физико-химическими методами	Хорошо владеет способами анализа физико-химическими методами	Отлично владеет способами анализа физико-химическими методами органических ве-

цессов с их участием с использованием современной вычислительной техники»			ми органических веществ	органических веществ	нических веществ	ществ
	Уметь (УП ОПК-3): Проводить изучение органических веществ по заданным методикам	Не умеет	Ограниченно умеет проводить изучение органических веществ по заданным методикам	Удовлетворительно умеет проводить изучение органических веществ по заданным методикам	Хорошо умеет проводить изучение органических веществ по заданным методикам	Отлично умеет проводить изучение органических веществ по заданным методикам
	Знать (ЗП ОПК-3): Строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений	Не знает	Ограниченно знает строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений	Удовлетворительно знает строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений	Хорошо знает строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений	Отлично знает строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений

ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА

Дисциплина «Теоретические основы спектральных методов»

Курс 2 семестр 3

Кафедра органической, неорганической и фармацевтической химии

Преподаватель – Абдурахманова Нурия Мулдагалиевна, доцент кафедры органической, неорганической и фармацевтической химии

Трудоемкость дисциплины 72 часа

Число дидактических единиц 5

Максимальное количество баллов за работу в течение семестра 100 баллов

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
Основной блок			
1.	Предоставление отчета по теме «Колебательная спектроскопия»	10	по расписанию
2.	Предоставление отчета по теме «Радиоспектроскопия. Метод ЭПР»	10	по расписанию
3.	Предоставление отчета по теме «Радиоспектроскопия. Метод ЯМР»	10	по расписанию
4.	Предоставление отчета по теме «Масс-	10	по расписанию

	спектрометрия»		
5.	Предоставление отчета по теме «Электронная спектроскопия»	10	по расписанию
6	Полнота ответа на зачете	50	по расписанию
Блок бонусов и штрафов			
6.	Активность на занятии	30	по расписанию
7.	Неподготовленное домашнее задание	-1	
8.	Пропуск занятия без уважительной причины	-2	
Всего		100	

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) 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»).

б) Дополнительная литература:

2. Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин Физические методы исследования в химии: Учебник для хим. Вузов.- М.: Высшая школа, 2009. – 288 с. (31 экземпляр).

в) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимый для освоения дисциплины

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех».

<https://biblio.asu.edu.ru>

Учетная запись образовательного портала АГУ

2. 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 содержит более 15 000 наименований изданий.

www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ

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

4. Электронная библиотечная система IPRbooks. www.iprbookshop.ru

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебные занятия проводятся в аудитории, имеющей: Столы – 8 шт. Стулья – 17 шт. Доска – 1 шт. Вытяжной шкаф – 1 шт. Плитка электрическая – 4 шт. Штатив с зажимами для бюреток - 2 шт. Бюретки – 2 шт. Спектрофотометр ПЭ5400 – 1 шт. Центрифуга – 1 шт. Термостат с ванночкой – 1 шт.

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).