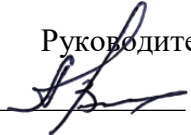


МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

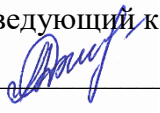
СОГЛАСОВАНО

Руководитель ОПОП

 А.В. Великородов
24 января 2025 г.

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ХМ

 Л.А. Джигола
24 января 2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**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

2021

Курс

5

Семестр

9

Астрахань-2025 г.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1.1. Целями освоения дисциплины (модуля) «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 (модуля): 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 (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина (модуль) «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;
- аналитическая химия.

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 и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной (модулем):

- преддипломная практика.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

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».

Таблица 1-Декомпозиция результатов обучения

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)

ПК-2 Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности	ИПК-2.1.1 способы выбора технических средств и методов испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач	ИПК-2.2.1 применять способы выбора технических средств и методов испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач	ИПК-2.3.1 способами выбора технических средств и методов испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач
---	---	---	---

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Объём дисциплины (модуля) составляет 4 зачётные единицы, в том числе 42 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 14 часов – лекции, 28 часов – лабораторные работы) и 102 часа – на самостоятельную работу обучающихся.

Таблица 2-Структура и содержание дисциплины (модуля)

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Сам. работа		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
							Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
Тема 1. Колебательная спектроскопия	9	4		8		22	Отчет по лабораторной работе
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	9	2		4		20	Отчет по лабораторной работе
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	9	4		8		20	Отчет по лабораторной работе
Тема 4. Масс-спектрометрия	9	2		4		20	Отчет по лабораторной работе
Тема 5. Электронная спектроскопия	9	2		4		20	Отчет по лабораторной работе
Итого		14		28		102	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

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Кол-во часов	Код компетенции	
		ПК-2	Общее количество компетенций
Тема 1. Колебательная спектроскопия	34	+	1
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	26	+	1
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	32	+	1
Тема 4. Масс-спектрометрия	26	+	1
Тема 5. Электронная спектроскопия	26	+	1
Итого	144		

Краткое содержание каждой темы дисциплины (модуля)

Тема 1. 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 спектро-

скопия. 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 2. 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 3. 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 4. 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 5. 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. Прерывание диссоциация 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 (модулю)

Преподаватель должен активно непосредственно участвовать в учебном процессе и проводить подготовку к нему. Необходимость постоянной подготовки к лекциям, семинарским и практическим занятиям обусловлена потребностью отражать современные подходы, взгляды, данные по темам и разделам. Проводя подготовку к учебному процессу необходимо изучать современные методические рекомендации, результаты научных исследований, новые технологии и т.д. При реализации различных видов учебной работы преподаватель должен использовать образовательные технологии: создание интерактивных презентаций, обучающие компьютерные программы, технологии развития мышления (эффективная лекция, таблицы, работа в группах и т.д.)

В ходе подготовки лекции преподаватель должен разрабатывать план лекции, в котором должен определить те основные материалы, которые слушатели должны понять и записать. Содержание лекции должно быть организованным и четким, что делает усвоение материала доступным. Содержание лекции должно отвечать следующим требованиям: изложение материала от простого к сложному; от известного к неизвестному; логичность, четкость и ясность в изложении материала; возможность проблемного изложения; дискуссии и диалога в конце лекции с целью активизации деятельности слушателей; опора смысловой части лекции на подлинные факты, события, явления, статистические данные; тесная связь теоретических положений и выводов с практикой и профессиональной деятельностью. В ходе лекционного занятия преподаватель должен четко озвучить тему, представить план, кратко изложить цель, учебные вопросы. Раскрывая содержание учебных вопросов, акцентировать внимание на основных категориях, явлениях и процессах, особенностях их протекания. Следует также раскрывать сущность и содержание различных точек зрения и научных подходов к объяснению тех или иных явлений и процессов. При изложении лекционного материала следует аргументировано обосновать собственную позицию по спорным теоретическим вопросам, приводя примеры, раскрывать положительный отечественный и зарубежный опыт. По ходу изложения, возможно, задавать риторические вопросы и самому давать на них ответ. Преподаватель в целом не должен отвлекаться от излагаемого материала лекции. Преподаватель должен руководить работой слушателей по конспектированию лекционного материала, подчеркивать необходимость отражения в конспектах основных положений изучаемой темы. Используемый во время лекции наглядный материал – слайды, таблицы, схемы, иллюстрации помогает вести конспекты и улучшает темп предложения материала лекций. В заключительной части лекции необходимо сформулировать общие выводы по теме, раскрывающие содержание всех вопросов, поставленных в лекции. Для закрепления материала, подготовки к семинарским и практическим занятиям и выполнения самостоятельной работы

необходимо рекомендовать литературу, основную и дополнительную, в том числе учебно-методические материалы, а также электронные источники (интернет-ресурсы).

Лабораторные занятия способствуют закреплению знаний полученных студентами в ходе обучения и самостоятельной работы, формированию компетенций, навыков в получении информации, приобретению умений провести ее обработку и анализ, овладению навыками планирования, анализа и управления. Общее требование при разработке тематики лабораторных таково - этот вид аудиторных занятий должен научить студента правильно оценить и предвидеть развитие ситуации, управлять ее формированием, владению методами анализа. На занятиях проводится отработка практических умений под контролем преподавателя. В конце каждого лабораторного занятия преподаватель планирует 6-7 минут для подведения итогов. Он обращает внимание на то, как освоен учебный материал по теме в целом, анализирует типичные ошибки и недоработки студентов, акцентирует их внимание на значимость темы.

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

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
Тема 1. Колебательная спектроскопия. Вращательная спектроскопия. Связь ядерного спина и вращения. Вращательные уровни энергии и волновые функции для различных типов молекул. Определение структуры молекул из вращательных спектров.	22	Конспектирование отчета по лабораторной работе
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР. Механизмы появления сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР. Дипольный и контактный механизмы СТВ, C-H-фрагмент, расчет констант СТВ с помощью метода МОХ,	20	Конспектирование отчета по лабораторной работе
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР. Проявление химического обмена в спектрах ЯМР, слияние линий при быстром обмене. Спектры ЯМР свободных радикалов.	20	Конспектирование отчета по лабораторной работе
Тема 4. Масс-спектрометрия. Молекулярный ион. Определение элементного состава ионов на основании изотопных пиков. Азотное правило. Определение содержания изотопа C13 в природных образцах. Расчет изотопной чистоты соединений.	20	Конспектирование отчета по лабораторной работе
Тема 5. Электронная спектроскопия. Колебательные функции, использование теории групп для определения колебательных состояний. Колебания многоатомных молекул, нормальные колебания, частоты колебаний.	20	Конспектирование отчета по лабораторной работе

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

Отчет по лабораторной работе должен содержать тему работы, цель работы, ход выполнения эксперимента, наблюдения и выводы по лабораторной работе. Другие требования к оформлению лабораторной работы изложены на образовательном портале по адресу: [http:// asu-edu.ru](http://asu-edu.ru).

Ниже приведен перечень вопросов для обсуждения при написании отчета по лабораторной работе.

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

Ниже приведены вопросы для самостоятельного изучения студентами.

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 лекции-диалога по теме «Колебательная спектроскопия» в объеме 4 ч. в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

6.1. Образовательные технологии

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Тема 1. Колебательная спектроскопия	Лекция-диалог	Не предусмотрены	Лабораторная работа в мини-группах
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Лабораторная работа в мини-группах
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Лабораторная работа в мини-группах
Тема 4. Масс-спектрометрия	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Лабораторная работа в мини-группах
Тема 5. Электронная спектроскопия	Обзорная лекция	Не предусмотрены	Лабораторная работа в мини-группах

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

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

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

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/>

Электронный каталог «Научные журналы АГУ»

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

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.

Справочная правовая система КонсультантПлюс.

Содержится огромный массив справочной правовой информации, российское и региональное законодательство, судебную практику, финансовые и кадровые консультации, консультации для бюджетных организаций, комментарии законодательства, формы документов, проекты нормативных правовых актов, международные правовые акты, правовые акты, технические нормы и правила.

<http://www.consultant.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 (модуля), результатов обучения по дисциплине (модулю) и оценочных средств

Контролируемый раздел, тема дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Тема 1. Колебательная спектроскопия	ПК-2	Отчет по лабораторной работе
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР	ПК-2	Отчет по лабораторной работе
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	ПК-2	Отчет по лабораторной работе
Тема 4. Масс-спектрометрия	ПК-2	Отчет по лабораторной работе
Тема 5. Электронная спектроскопия	ПК-2	Отчет по лабораторной работе

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

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, неспособен 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 и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине (модулю)

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

Тема. Колебательная спектроскопия.

Вопросы для обсуждения.

1. Проявление колебательных переходов в спектрах инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР), правила отбора.
2. Валентные и деформационные колебания, характеристические частоты, применение ИК и КР-спектроскопии в химических исследованиях.
3. Электронно-колебательное взаимодействие, эффект Яна-Теллера.

Тема. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.

Вопросы для обсуждения.

1. Условия магнитного резонанса, устройство радиоспектрометров.
2. Классическая и квантовая интерпретации резонанса.
3. Интенсивность линий, времена релаксации.
4. Насыщение линий. Спин-гамильтониан, константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ).

Тема. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР.

Вопросы для обсуждения.

1. ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода.
2. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования.
3. Тонкая структура спектров ЯМР.
4. Природа расщеплений в спектрах ЯМР.

Тема. Масс-спектрометрия.

Вопросы для обсуждения.

1. Физические основы масс-спектрометрического распада.
2. Метастабильные ионы.
3. Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада.

4. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров.
5. Стабильность ионов и нейтральных частиц. сс-спектров. Использование для интерпретации дополнительной масс-спектральной информации.

Тема. Электронная спектроскопия.

Вопросы для обсуждения.

1. Классификация электронных переходов.
2. Интенсивность и положение полос поглощения.
3. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка-Кондона.
4. Связь спектров поглощения и люминесценции.
5. Время жизни и квантовый выход люминесценции, внутренняя и интеркомбинационная конверсия.

Перечень вопросов и заданий, выносимых на экзамен

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.

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	Выберите правильный ответ. Величину адсорбции из газовой фазы измеряют: а) объемным методом. б) амперометрическим методом. в) весовым методом. г) поляриметрическим методом	а)	3
2.		Выберите правильный ответ. а) энергия координационной связи выше, чем энергия ковалентной связи. б) энергия координационной связи ниже, чем энергия ковалентной связи. в)	б)	3

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		энергия координационной связи равна энергии ковалентной связи		
3.		Выберите правильный ответ. Гомолитический разрыв связи О–Н в молекуле воды приводит к образованию: а) $\text{H} \cdot + \text{OH}^+$. б) $\text{H}^{++} + \text{OH}^-$. в) $\text{O}_2^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$. г) $\text{H}^{++} + \text{:OH}$.	г)	3
4.		Выберите правильный ответ. Согласно Рогинскому, каталитические реакции можно разделить на: а) окислительно-восстановительные (одноэлектронные). б) гомофазные. в) кислотно-основные (ионные). г) гетерофазные	в)	3
5.	Задание открытого типа	Напишите развернутый ответ 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	энергия координационной связи равна энергии ковалентной связи в химическом соединении	3
6.		Напишите развернутый ответ Вблизи от равновесия реакции $\text{A} \leftrightarrow \text{B}$ катализатор ускоряет: а) реакцию $\text{A} \rightarrow \text{B}$. б) реакцию $\text{B} \leftarrow \text{A}$. в) в равной степени реакцию $\text{A} \rightarrow \text{B}$ и $\text{B} \leftarrow \text{A}$. г) не ускоряет ни одну из выше обозначенных	в равной степени реакцию $\text{A} \rightarrow \text{B}$ и $\text{B} \leftarrow \text{A}$ в этой заключается суть катализа	3
7.		Напишите развернутый ответ Величину адсорбции из газовой фазы измеряют: а) объемным методом. б) амперометрическим методом. в) весовым методом. г) поляриметрическим методом	объемным методом по разнице объемов газовой фазы вступившей в реакцию и полученной после протекания химической реакции.	3
8.		Напишите развернутый ответ Уравнение Генри описывается выражением:	$a = \text{KH}/p$ или $a = \text{KH}/c$.	3

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		а) $a = \text{КНр}$ или $a = \text{КНс}$. б) $a = \text{КН/ р}$ или $a = \text{КН/ с}$. в) $a = \text{КН р}$ или $a = \text{КН с}$. г) $a = \text{КН- р}$ или $a = \text{КН-с}$.		
9.	Задания комбинированного типа	Напишите ответ с обоснованием. 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	а) энергия координационной связи равна энергии ковалентной связи в химическом соединении, поскольку все эти химические связи ковалентные	3
10.		Напишите ответ с обоснованием. Величину адсорбции из газовой фазы измеряют: а) объемным методом. б) амперометрическим методом. в) весовым методом. г) поляриметрическим методом	а) объемным методом по разнице объемов газовой фазы вступившей в реакцию и полученной после протекания химической реакции.	3

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 результатов обучения по дисциплине (модулю)

Текущий и внутрисеместровый контроль, промежуточная аттестация учебных достижений студентов проводится путем балльно-рейтинговой системы. Общая оценка учебных достижений студента в семестре по учебному курсу определяется как сумма баллов, полученных студентом по различным формам текущего и промежуточного контроля в течение данного семестра. Итоговой формой отчетности является экзамен, поэтому балльная оценка распределяется на две составляющие: семестровую (текущий контроль по учебной дисциплине в течение семестра) – 50 баллов и экзаменационную – 50 баллов. 50 баллов семестрового контроля состоят из 40 баллов, полученных на различных формах текущего контроля, и 10 баллов, включающих различного рода бонусы (отсутствие пропусков занятий, активная работа в течение семестра).

Перечень вопросов.

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.

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	Выполнение лабораторной работы по теме «Колебательная спектроскопия».	1/8	8	по графику
2	Выполнение лабораторной работы по теме «Радиоспектроскопия. Метод ЭПР».	1/8	8	по графику
3	Выполнение лабораторной работы по теме «Радиоспектроскопия. Метод ЯМР».	1/8	8	по графику
4	Выполнение лабораторной работы по теме «Масс-спектрометрия».	1/8	8	по графику
5	Выполнение лабораторной работы по теме «Электронная спектроскопия»	1/8	8	по графику
Всего			40	
Блок бонусов				
7	Активность на занятии		5	
8	Своевременное выполнение всех заданий		5	
Всего			10	-
Дополнительный блок**				
9	Экзамен		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)
85–89	4 (хорошо)
75–84	
70–74	
65–69	
60–64	3 (удовлетворительно)
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)

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 (МОДУЛЯ)

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 (модуля)

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».

[wwwHYPERLINK "http://www.biblio-online.ru/"](http://www.biblio-online.ru/).HYPERLINK "http://www.biblio-online.ru/"[biblioHYPERLINK "http://www.biblio-online.ru/"](http://www.biblio-online.ru/)-HYPERLINK "http://www.biblio-online.ru/"[onlineHYPERLINK "http://www.biblio-online.ru/"](http://www.biblio-online.ru/).HYPERLINK "http://www.biblio-online.ru/"[ru](http://www.biblio-online.ru/)

Электронная библиотечная система IPRbooks. [wwwHYPERLINK](http://www.iprbookshop.ru/)

["http://www.iprbookshop.ru/"](http://www.iprbookshop.ru/).HYPERLINK "http://www.iprbookshop.ru/"[iprbookshopHYPERLINK](http://www.iprbookshop.ru/) "http://www.iprbookshop.ru/"[ru](http://www.iprbookshop.ru/)

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Занятия проводятся в аудитории, имеющей: Занятия проводятся в аудитории, имеющей: мультимедийные средства, презентации лекций, наглядные пособия, компьютеры, ИК-спектрофотометр ИКС-29.

Рабочая программа дисциплины (модуля) при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. Для инвалидов содержание рабочей программы дисциплины (модуля) может определяться также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).