

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.Г.Тырков
31 августа 2022 г.

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой химии
_____ Л.А.Джигола
31 августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Составитель	Абдурахманова Н.М., доцент, к.х.н., доцент
Направление подготовки / специальность	04.03.01 «ХИМИЯ»
Направленность (профиль) ОПОП	ХИМИЯ
Квалификация (степень)	бакалавр
Форма обучения	Очная
Год приема	2021
Курс	2
Семестр	4

Астрахань - 2022

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения дисциплины «Спектральные методы анализа органических веществ» является ознакомление студентов со спектральными методами исследования органических соединений.

1.2. Задачи освоения дисциплины:

- классификация спектральных методов исследования, законы, лежащие в основе спектральных методов исследования;
- принцип работы и устройство спектрометров различных видов, характеристика спектральных методов исследования, возможности и ограничения метода.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина «Спектральные методы анализа органических веществ» относится к элективной части Б1.Д.04. 02 и осваивается в 4 семестре.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими учебными дисциплинами: учебный курс логически связан с теоретическими основами и практическими навыками, полученными при изучении бакалаврами «Органическая химия».

Знания: состав, строение и свойства органических веществ – представителей основных классов органических соединений (углеводородов гомофункциональных соединений, гетерофункциональных соединений, гетероциклических соединений).

Умения: использовать знания по химическим свойствам и электронному строению органических соединений, составлять ряды закономерностей изменения свойств химических соединений

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 спектроскопии; 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. Последующие учебные дисциплины, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной: «Органическая химия», «Аналитическая химия», «Неорганическая химия».

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

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

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

А) профессиональные:

ПК-3 Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам.

Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ПК-3	ИПК-3.1.1 Демонстрирует специальные научные знания в т.ч. в предметной области. ИПК-3.1.2 Демонстрирует знание современных представлений о строении вещества, зависимости строения и свойств веществ от положения составляющих их элементов в ПСМ и характера химических связей. ИПК-3.1.3 Показывает знания основ гомогенного и гетерогенного катализа, закономерностей протекания окислительно-восстановительных процессов.	ИПК-3.2.1 Осуществляет трансформацию специальных научных знаний в соответствии с психофизиологическими, возрастными, познавательными особенностями обучающихся, в т.ч. с особыми образовательными потребностями. ИПК-3.2.2 Использует основные законы аналитической химии, закономерности протекания различных процессов при проведении теоретических занятий и лабораторных работ. ИПК-3.2.3 Умеет пользоваться химической посудой, реактивами, химическим оборудованием с соблюдением правил техники безопасности.	ИПК-3.3.1 Осуществляет урочную и внеурочную деятельность в соответствии с предметной областью согласно освоенному профилю (профилям) подготовки ИПК-3.3.2 Владеет основами аналитической химии, закономерностями протекания различных процессов ИПК-3.3.3 Владеет методиками постановки экспериментов и обработки результатов ИПК-3.3.4 Владеет методами научно-педагогического исследования в предметной области.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, в том числе 54 часа, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них лекции-18 часов, практическая работа-36 часов) и 18 часов на самостоятельную работу обучающихся.

Таблица 2 - Структура и содержание дисциплины

№	Наименование радела (темы)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самостоят. работа		Формы текущего контроля успеваемости <i>(по неделям семестра)</i> Форма промежуточной аттестации <i>(по семестрам)</i>
			Л	ЛР	ПЗ	КР	СР	
1	Тема 1. Колебательная спектроскопия.	3	3		7		7	Контрольная работа №1
2	Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	3	4		7		7	Контрольная работа №2
3	Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	3	4		8		8	Контрольная работа №3
4	Тема 4. Масс- спектрометрия	3	4		7		7	Контрольная работа №4
5	Тема 5. Электронная спектроскопия.	3	3		7		7	Тестовая работа
ИТОГО			18		36		18	ЗАЧЕТ (тестирование)

Таблица 3 -Матрица соотнесения тем учебной дисциплины и формируемых в них компетенций

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции	Σ общее количество компетенций
		ПК-3	
Тема 1. Колебательная спектроскопия.	17	+	1
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	18	+	1
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	22	+	1
Тема 4. Масс-спектрометрия	18	+	1
Тема 5. Электронная спектроскопия.	17	+	1
ИТОГО	72		

Краткое содержание каждой темы дисциплины

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 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 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 Мак-Коннела. 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.

Система ввода образца. Хроматомасс-спектрометрия. Жидкостная хроматография-масс-спектрометрия. Физические основы процесса масс-спектрометрического распада. Электронный удар или электронная ионизация. 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. Масс-спектрометрия с преобразованиями Фурье. Квадрупольный анализатор. Ионная ловушка. Времяпролетный анализатор. Детектирование ионов. Тандемная масс-

спектрометрия. Активация ионов. Активация соударением или диссоциация, индуцированная столкновениями. Фотодиссоциация. Поверхностно-индуцированная диссоциация. Анализаторы ионов в тандемной масс-спектрометрии. Магнитные секторные приборы. Ионная ловушка. Масс-спектрометрия с преобразованиями Фурье. Приборы продленной и гибридной геометрии. Инверсия заряда. Основные направления фрагментации важнейших классов органических соединений. Количественный масс-спектрометрический анализ. Масс-хроматография. Установление количества соединения в образце по площади хроматографического пика. Метод внешнего стандарта. Метод внутреннего стандарта. Метод добавок. Метод изотопного разбавления.

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. Преддиссоциация 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

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

Лекционные занятия проводятся каждую неделю в объеме 2 часов. Лабораторные занятия проводятся раз в две недели в объеме 4 часов. По окончании изучения каждой темы студенты выполняют контрольные работы

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Таблица 4 – Содержание самостоятельной работы обучающихся

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
Тема 1. Классификация хроматографических методов по режиму хроматографирования, агрегатному состоянию фаз, механизму взаимодействия сорбат – сорбент, применяемой технике, способу относительного перемещения фаз. Значение разделения и концентрирования с неселективным и селективным детектированием в гибридных методах анализа для улучшения метрологических характеристик анализа и информативности аналитических данных.	7	Собеседование
Тема 2. Принципиальная схема хроматографа. Выбор условий хроматографического определения. Качественный и количественный анализ в хроматографии. Подходы к идентификации веществ: использование индексов удерживания, стандартной добавки и свидетеля, графических методов, спектральных и химических методов. Измерение высот и площадей пиков.	7	Собеседование

Тема 3. Основные характеристики некоторых зарубежных и отечественных хроматографов. Системы автоматизации анализа. Применение микроЭВМ и компьютеров для управления работой хроматографа и обработки хроматографической информации.	8	Собеседование
Тема 4. Области применения ионной хроматографии. Примеры применения при анализе смесей неорганических и органических анионов и катионов. Эксклюзионная хроматография (гель-хроматография). Сущность метода. Гидрофильные и гидрофобные гели. Особенности механизма удерживания молекул. Области применения гель-хроматографии.	7	Собеседование
Тема 5. Электрофоретическая подвижность ионов и влияющие на нее факторы. Аппаратура. Детекторы. Области применения электросепарационных методов. Сравнение их с ВЭЖХ.	7	Собеседование

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

Темы собеседований по дисциплине «Спектральные методы анализа органических соединений» выбираются студентами в течение месяца и обсуждаются с преподавателем.

Тема 1. Классификация хроматографических методов по режиму хроматографирования, агрегатному состоянию фаз, механизму взаимодействия сорбат – сорбент, применяемой технике, способу относительного перемещения фаз. Значение разделения и концентрирования с неселективным и селективным детектированием в гибридных методах анализа для улучшения метрологических характеристик анализа и информативности аналитических данных.

1. 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.
2. Обмен по двум положениям, медленный и быстрый обмены. Определение скорости обмена из спектров ЭПР. Обмен по многим положениям. Усреднение анизотропных взаимодействий в спектрах ЭПР.
3. 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 2. Принципиальная схема хроматографа. Выбор условий хроматографического определения. Качественный и количественный анализ в хроматографии. Подходы к идентификации веществ: использование индексов удерживания, стандартной добавки и свидетеля, графических методов, спектральных и химических методов. Измерение высот и площадей пиков.

1. ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования. 13. 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.

2. Связь констант спин-спинового взаимодействия со строением молекул. Проявление химического обмена в спектрах ЯМР, слияние линий при быстром обмене.

6. Спектры ЯМР свободных радикалов. Проявление водородных связей в спектрах ЯМР. Двойной ядерно-ядерный резонанс, химическая поляризация ядер. Спектры NOESY, COESY.

Тема 3. Основные характеристики некоторых зарубежных и отечественных хроматографов. Системы автоматизации анализа. Применение микроЭВМ и компьютеров для управления работой хроматографа и обработки хроматографической информации.

1. Система ввода образца. Хроматомасс-спектрометрия.

2. Жидкостная хроматография-масс-спектрометрия.

3. Физические основы процесса масс-спектрометрического распада.

4. Электронный удар или электронная ионизация.

5. Физические основы масс-спектрометрического распада.

6. Метастабильные ионы.

7. Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада.

Тема 4. Области применения ионной хроматографии. Примеры применения при анализе смесей неорганических и органических анионов и катионов. Эксклюзионная хроматография (гель-хроматография). Сущность метода. Гидрофильные и гидрофобные гели. Особенности механизма удерживания молекул. Области применения гель-хроматографии.

1. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Стабильность ионов и нейтральных частиц. Правило выброса максимального алкильного радикала.

2. Правило Стивенсона-Одье.

3. Правила распада четноэлектронных ионов.

Тема 5. Электрофоретическая подвижность ионов и влияющие на нее факторы. Аппаратура. Детекторы. Области применения электросепарационных методов. Сравнение их с ВЭЖХ.

1. Правило степеней свободы.

2. Прочность химических связей.

3. Структурные и стереохимические факторы.

4. Орто-Эффект.

5. Концепция локализации заряда и неспаренного электрона.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки реализация компетентного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (разбор конкретных ситуаций, дебаты, портфолио круглые столы) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся. В ходе реализации данной дисциплины предусмотрено проведение интерактивных занятий в объеме 4 ч, из них 2 ч – лекции, 2 ч – практические занятия.

6.1. Образовательные технологии

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практические занятия, семинар	Лабораторная работа
Тема 1. Колебательная спектроскопия.	Лекция-презентация	Средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимися, на темы, связанные с изучаемой дисциплиной и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме.	Не предусмотрено
Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	Лекция-презентация		Не предусмотрено
Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	Лекция-презентация		Не предусмотрено
Тема 4. Масс-спектрометрия	Лекция-презентация		Не предусмотрено
Тема 5. Электронная спектроскопия.	Лекция-презентация	Средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу.	Не предусмотрено

6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- использование возможностей интернета в учебном процессе (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление обучающихся с оценками и т. д.);
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронных библиотек, журналов и т. д.) как источников информации;
- использование возможностей электронной почты преподавателя;
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т. д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т. е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);
- использование виртуальной обучающей среды (LMS Moodle «Электронное образование») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

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
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
Scilab	Пакет прикладных математических программ
Microsoft Security Assessment Tool. Режим доступа: http://www.microsoft.com/ru-ru/download/details.aspx?id=12273 (Free) Windows Security Risk Management Guide Tools and Templates. Режим доступа: http://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=6232 (Free)	Программы для информационной безопасности
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением
1С: Предприятие 8	Система автоматизации деятельности на предприятии
KOMPAS-3DV21	Создание трёхмерных ассоциативных моделей отдельных элементов и сборных конструкций из них
Blender	Средство создания трёхмерной компьютерной графики
PyCharm EDU	Среда разработки
R	Программная среда вычислений
VirtualBox	Программный продукт виртуализации операционных систем
VLC Player	Медиапроигрыватель
Microsoft Visual Studio	Среда разработки
Cisco Packet Tracer	Инструмент моделирования компьютерных сетей
CodeBlocks	Кроссплатформенная среда разработки
Eclipse	Среда разработки
Lazarus	Среда разработки
PascalABC.NET	Среда разработки

VMware (Player)	Программный продукт виртуализации операционных систем
Far Manager	Файловый менеджер
Sofa Stats	Программное обеспечение для статистики, анализа и отчётности
Maple 18	Система компьютерной алгебры
WinDjView	Программа для просмотра файлов в формате DJV и DjVu
MATLAB R2014a	Пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений
Oracle SQL Developer	Среда разработки
VISSIM 6	Программа имитационного моделирования дорожного движения
VISUM 14	Система моделирования транспортных потоков
IBM SPSS Statistics 21	Программа для статистической обработки данных
ObjectLand	Геоинформационная система
КРЕДО ТОПОГРАФ	Геоинформационная система
Полигон Про	Программа для кадастровых работ

6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

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

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

Учётная запись образовательного портала АГУ

Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретённым на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог содержит более 15 000 наименований изданий.

www.studentlibrary.ru

Регистрация с компьютеров АГУ

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

7.1. Паспорт фонда оценочных средств.

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Теоретические основы хроматографических 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 6 - Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств

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

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

Таблица 7 -Критерии оценивания результатов обучения

5 «отлично»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять; - последовательное, правильное выполнение всех заданий; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы.
4 «хорошо»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять; - последовательное, правильное выполнение всех заданий; -возможны единичные ошибки, исправляемые самим студентом после замечания преподавателя; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы.
3 «удовлетворительно»	-затруднения с комплексной оценкой предложенной ситуации; -неполное теоретическое обоснование, требующее наводящих вопросов преподавателя; -выполнение заданий при подсказке преподавателя; - затруднения в формулировке выводов.
2 «неудовлетворительно»	- неправильная оценка предложенной ситуации; -отсутствие теоретического обоснования выполнения заданий.

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

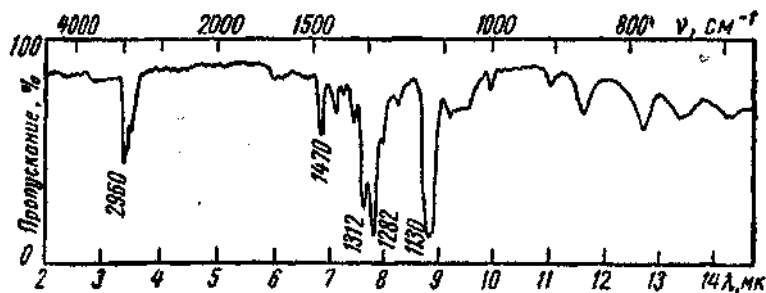
	делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, неспособен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении 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).

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 $C_6H_{14}O_2S$.

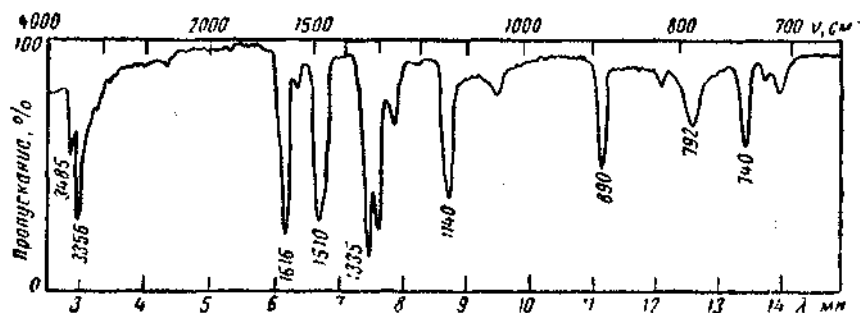


2. Проводя реакцию нитрования бензола, студент при приготовлении нитрующей смеси по ошибке вместо концентрированной серной кислоты использовал фосфорную. ИК-спектр полученного продукта реакции имеет следующие частоты: 3080, 2960, 1600, 1540, 1460, 1345, 1310, 850, 780, 690 (cm^{-1}). На основании спектральных 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 $C_6H_4Cl_2N_2O_2$ имеет спектр, приведенный на рис. (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.

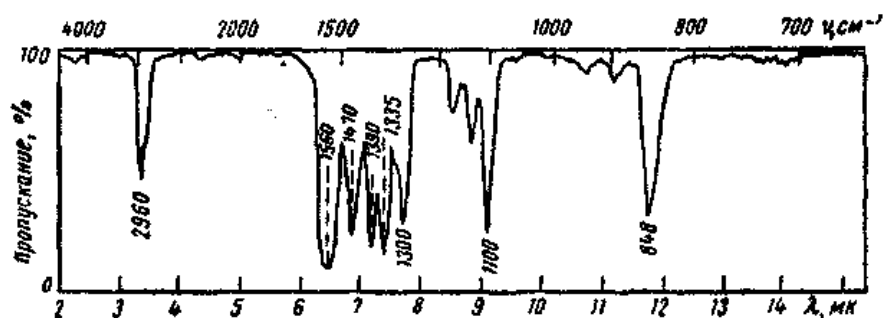


2. Идентифицируйте ароматический углеводород состава C_8H_{10} по его ИК-спектру: 3020, 2930, 2860, 1600, 1500, 1460, 1380, 810 (cm^{-1}). Какие продукты образуются в результате реакций хлорирования этого углеводорода в присутствии хлорида алюминия и при облучении УФ-светом? Напишите схему реакции окисления 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 $C_3H_7O_2N$ (жидкая пленка)?

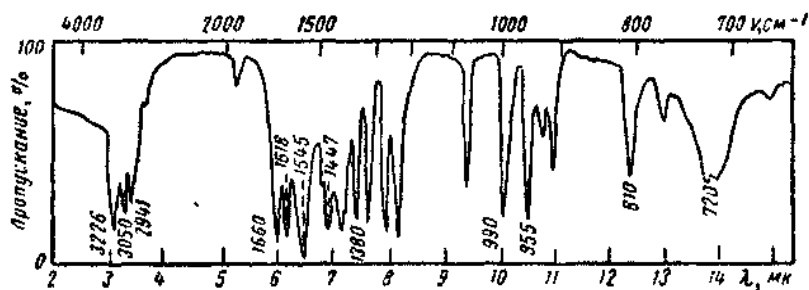


2. Установите строение соединения состава C_9H_{12} , которое при бромировании на свету при нагревании образует преимущественно галогенпроизводное $C_9H_{11}Br$ и имеет ИК-спектр со следующими частотами 3100 cm^{-1} , 2900 cm^{-1} , 1600 cm^{-1} , 1450-1430 cm^{-1} , 1340-1360 cm^{-1} , 1080 cm^{-1} , 1040 cm^{-1} , 1020 cm^{-1} , 940 cm^{-1} , 890 cm^{-1} , 750 cm^{-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 KBr). Какие структурные элементы можно определить по спектру?

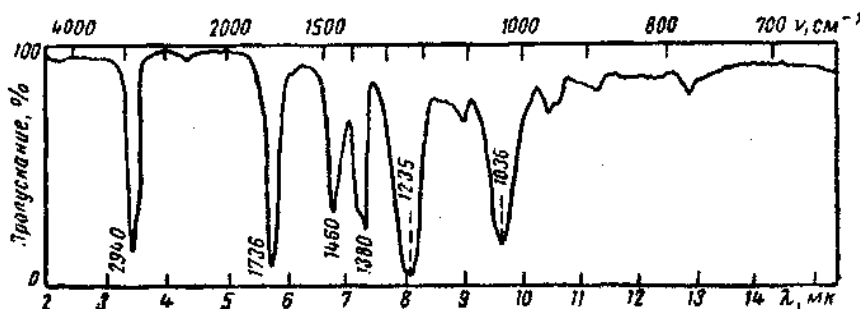


2. Определите строение соединения состава $C_5H_{13}N$, взаимодействующего с хлороводородом, не вступающего в реакции с азотистой кислотой и хлористым ацетилом. В ИК-спектре этого соединения имеются валентные колебания в области 1030 – 1230 cm^{-1} (дублет). (№605)

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)?

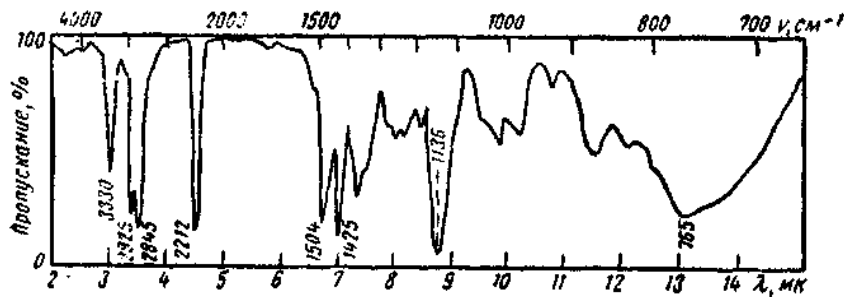


2. Углеводород состава C_8H_6 с аммиачным раствором оксида серебра образует осадок; ИК-спектр углеводорода имеет следующие частоты поглощения: 3400 см^{-1} , 3100 см^{-1} , 2100 см^{-1} , 1500 см^{-1} , 1450 см^{-1} , 1280 см^{-1} , 1185 см^{-1} , 1070 см^{-1} , 1030 см^{-1} , 910 см^{-1} , 760 см^{-1}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

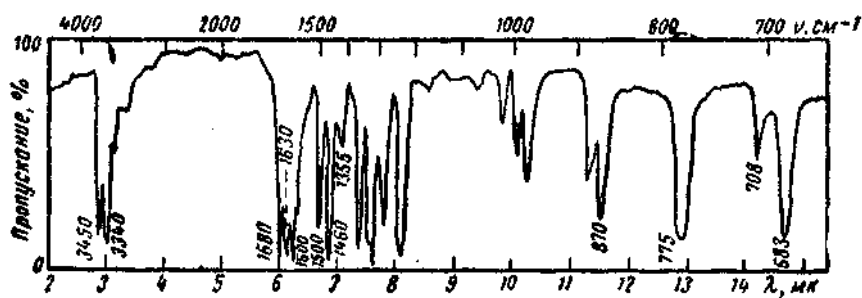


2. Определите строение углеводорода состава C_5H_8 , если известно, что он не реагирует с аммиачным раствором однохлористой меди, при восстановлении образует олефин, озонлизом которого получены уксусный и пропионовый альдегиды. В ИК-спектре углеводорода имеется полоса в области 220 см^{-1} . (№809)

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)?

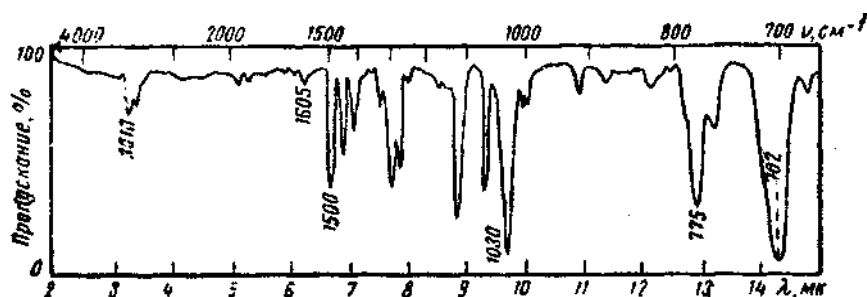


2. Установите строение вещества состава C_6H_{10} , который с аммиачным раствором оксида серебра дает осадок, а в результате гидратации образует кетон. В ИК-спектре углеводорода имеются полосы в области $3300-3200$ и $2140-2100\text{ см}^{-1}$. (№810)

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 $(C_6H_5CH_2)_2SO$.

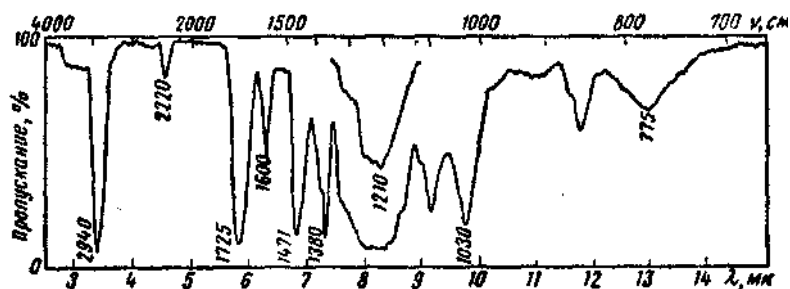


2. Напишите возможные структурные формулы соединения состава $C_5H_{10}O_2$, которое гидролизруется щелочью с образованием метилового спирта, а в ИК-спектре имеется две сильные полосы в области $1050 - 1300\text{ см}^{-1}$, а также сильная полоса около 1740 см^{-1} .

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

Вариант 9.

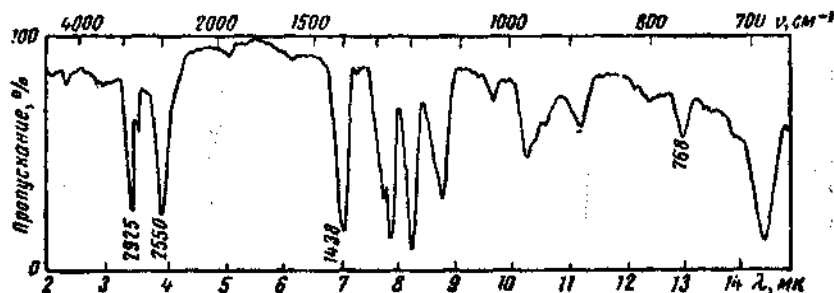
1. По ИК-спектру (жидкая пленка) и брутто-формуле $C_9H_{13}O_2N$ определите структурные элементы соединения.



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

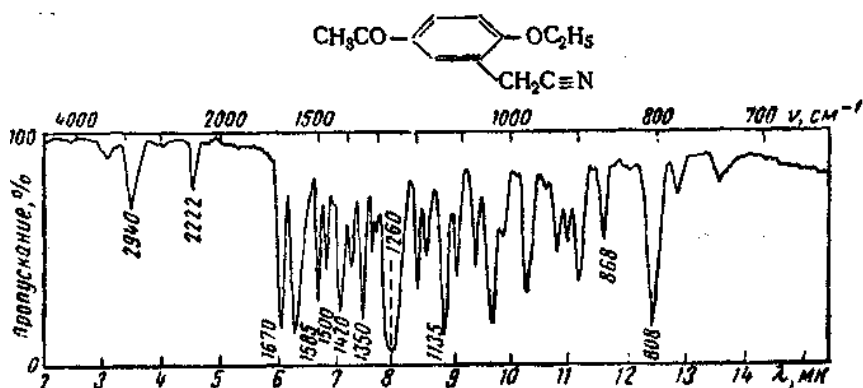
1. В какие функциональные группы входят атомы серы в соединении $C_2H_6S_2$ (жидкая пленка).



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 $970-960\text{ см}^{-1}$ и средняя в области 1675 см^{-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.

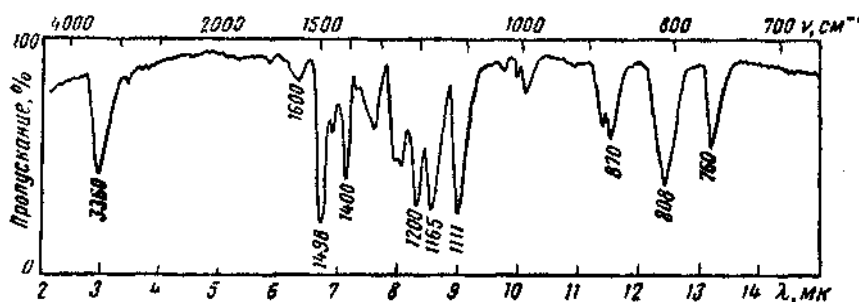
1. Сопоставьте основные полосы поглощения в ИК-спектре, приведенном на рис., с соответствующими колебаниями групп соединения



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 KBr) и брутто-формуле C_7H_7ClO ?

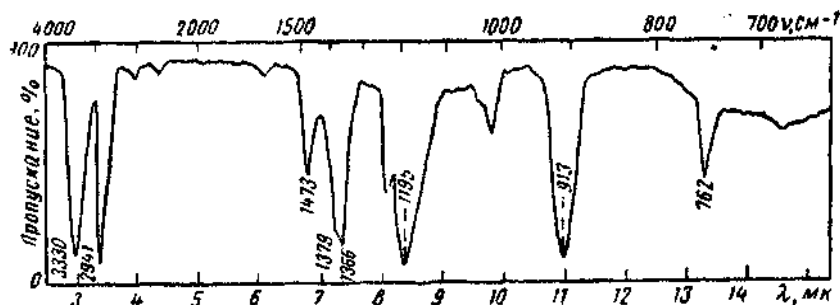


2. Установите строение соединения состава C_9H_{12} , которое при бромировании на свету при нагревании образует преимущественно галогенпроизводное $C_9H_{11}Br$ и имеет ИК-спектр со следующими частотами 3100 см^{-1} , 2900 см^{-1} , 1600 см^{-1} , $1450\text{--}1430\text{ см}^{-1}$, $1340\text{--}1360\text{ см}^{-1}$, 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.

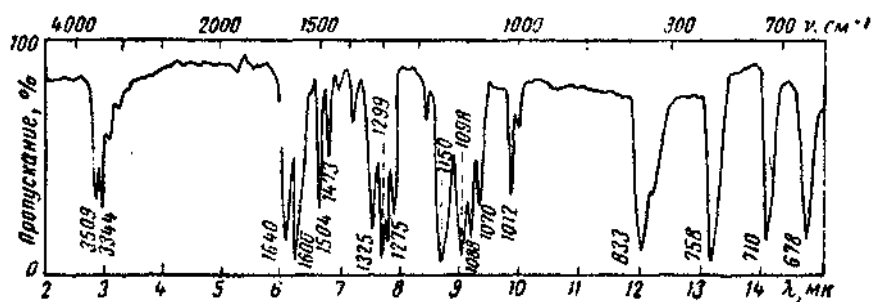


2. Идентифицируйте ароматический углеводород состава C_8H_{10} по его ИК-спектру: 3020 , 2930 , 2860 , 1600 , 1500 , 1460 , 1380 , $810\text{ (см}^{-1}\text{)}$. Какие продукты образуются в результате реакций хлорирования этого углеводорода в присутствии хлорида алюминия и при облучении УФ-светом? Напишите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

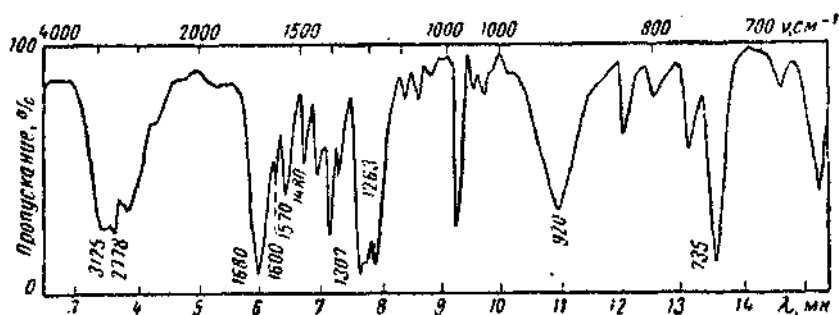
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 14.

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



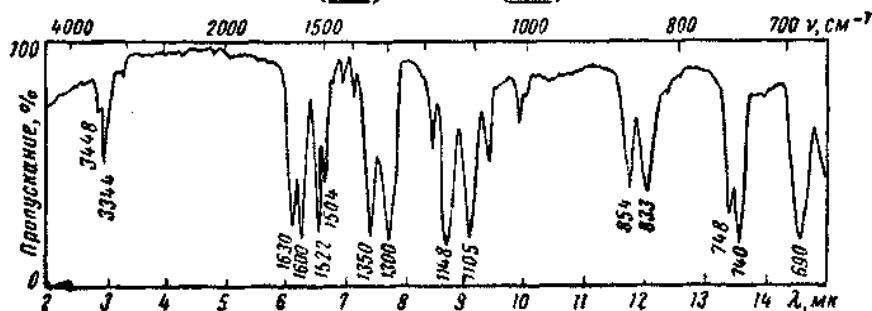
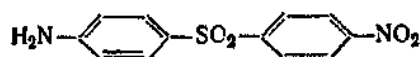
2. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_8O_2$?



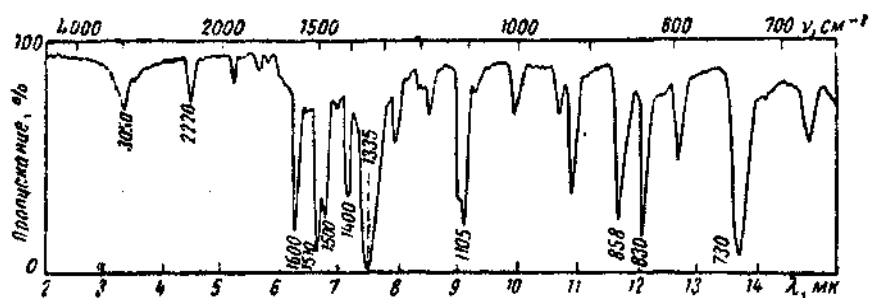
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант 15.

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



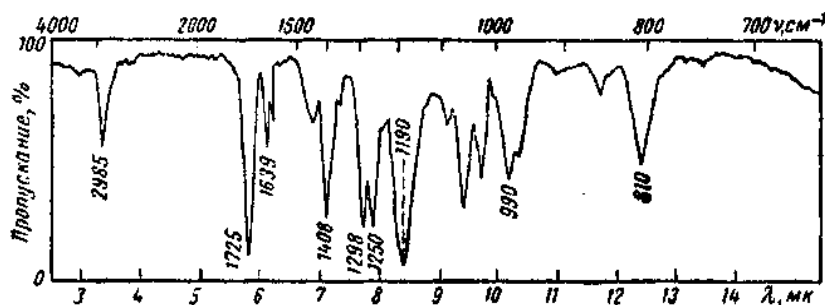
2. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_6O_2N_2$ (в пластинке KBr)?



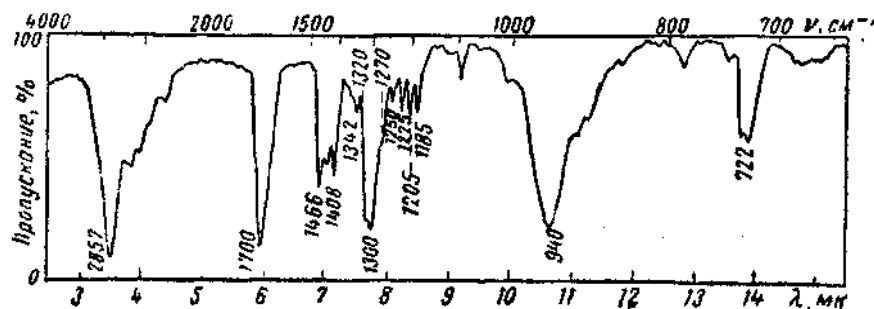
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант № 16.

1. Выскажите предположение о структуре соединения по приведенному ИК-спектру и брутто-формуле $C_5H_8O_2$ (жидкая пленка).



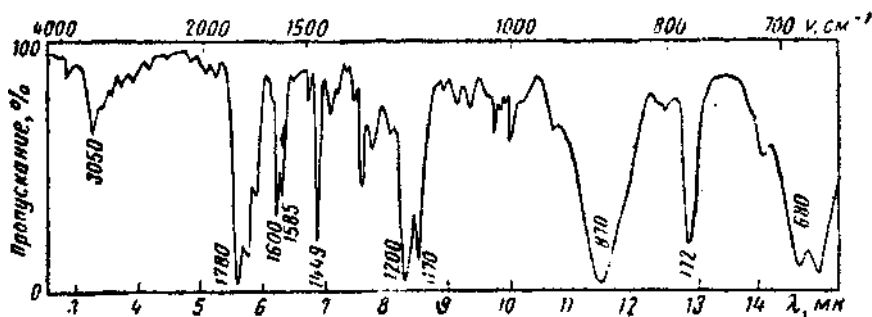
2. Объясните спектр соединения с брутто-формулой $C_{16}H_{32}O_2$, снятый для твердого соединения.



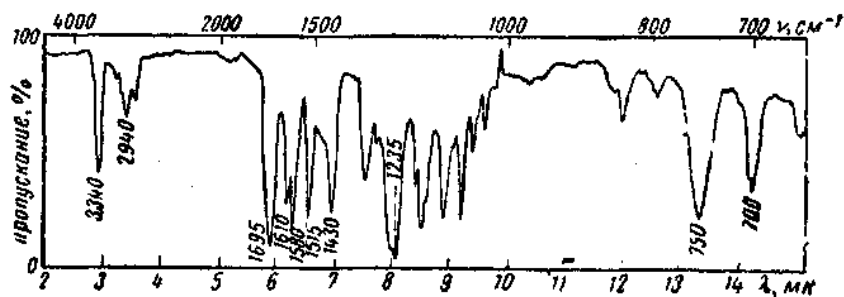
3. ИК-спектроскопия: сущность метода, достоинства и недостатки. Типы колебаний. ИК-спектр: условия возникновения, правила расшифровки, влияние различных заместителей на полосы поглощения.

Вариант № 17.

1. К какому типу соединений относится вещество C_7H_5OCl , спектр которого показан на рис. (жидкая пленка)?



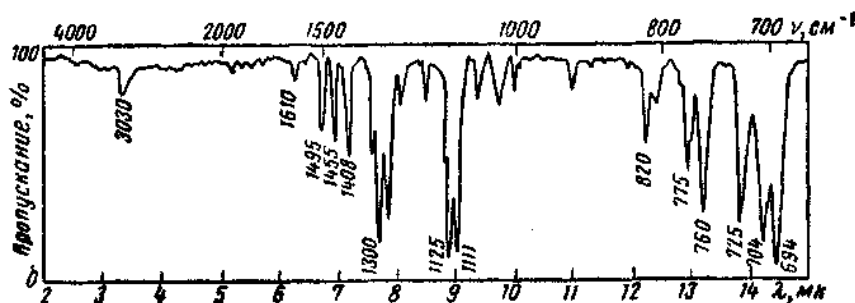
2. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_9H_{11}O_2N$ (жидкая пленка)?



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 $(C_6H_5CH_2)_2SO_2$.



2. В результате взаимодействия 1-бромбутана с аммиаком получены два соединения, при ацилировании которых уксусным ангидридом соответственно образуются соединения А и Б. На основании ИК-спектров веществ А ($3310, 2960, 2865, 1650, 1550, 1420, 1370 \text{ см}^{-1}$) и Б ($2960, 2865, 1650, 1415, 1370 \text{ см}^{-1}$) 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.

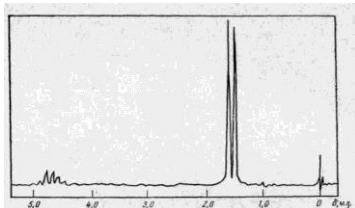
Вариант 2.

1. С помощью спектроскопии ПМР докажите, 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.

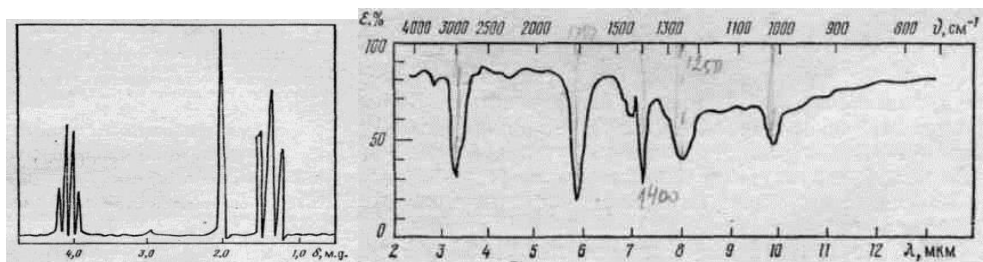
1. Определите строение соединения $C_3H_7O_2N$ по ПМР-спектру, представленному на рисунке



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.

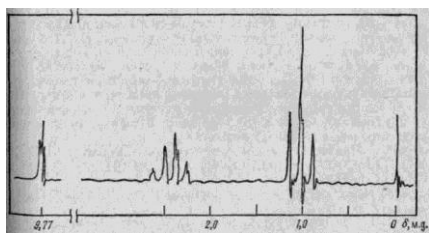
Вариант 5.

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.

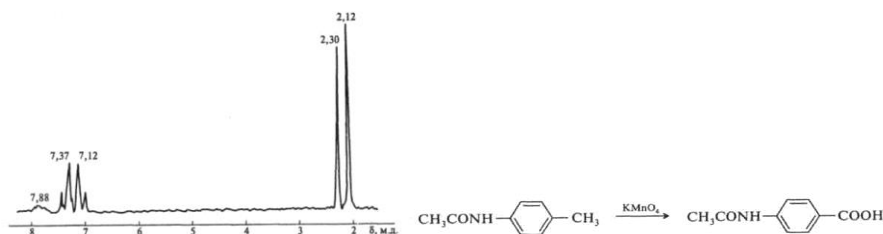
1. В ИК-спектре вещества состава $C_5H_{10}O$ имеется полоса при 1715 см^{-1} ; в ПМР-спектре (ПМР-спектр подтверждает отсутствие ароматических или олефиновых протонов) имеется триплет в области 1 м.д. и квадруплет в области 3,5 м.д. (относительно ТМС); вещество образует оксим, присоединяет синильную 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*-метилацетанилида.



2. Зависимость резонансной частоты от структуры.

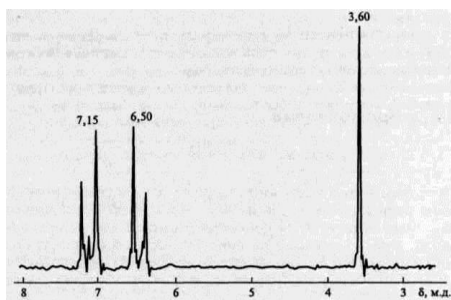
Вариант 2.

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.

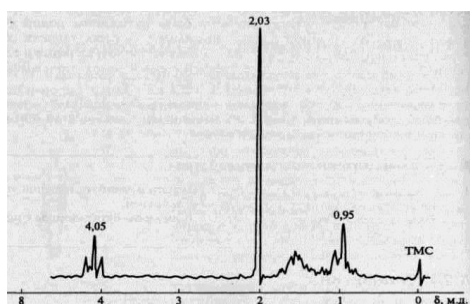
1. Сделайте соотнесение сигналов в спектре ПМР *n*-бromoанилина. Можно ли на основании этого спектра сделать вывод о полноте удаления ацетильной группы?



2. Влияние температуры концентрации и растворителя на резонансные сигналы.

Вариант 4.

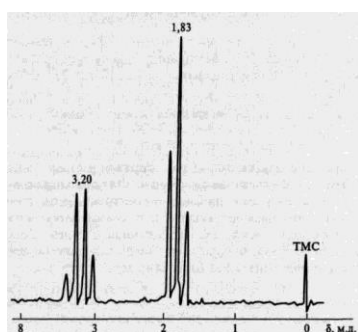
1. Для каких сигналов в спектре ПМР бутилацетата можно сделать надежное отнесение? Чем обусловлена мультиплетность сигнала в области 1,5 м.д.?



2. Влияние внутренних факторов на химический сдвиг.

Вариант 5.

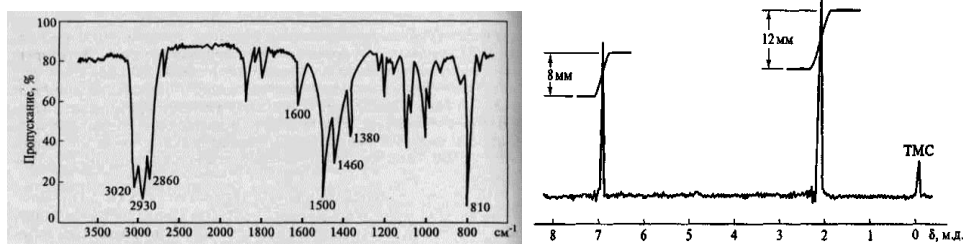
1. Спектр ПМР полученного иодэтана приведен на рисунке. Определите, является ли продукт реакции чистым или он содержит примесь исходного этанола.



2. Влияние индуцированных магнитных моментов соседних атомов и групп.

Вариант 6.

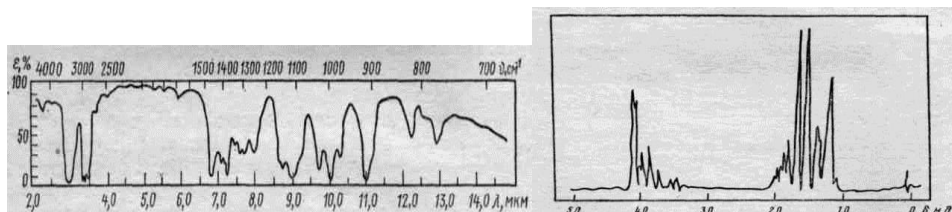
1. Идентифицируйте ароматический углеводород состава C_8H_{10} по его ИК- и ПМР-спектрам.



2. Зависимость химического сдвига от индукционного эффекта.

Вариант 7.

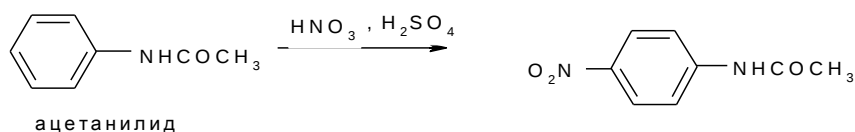
1. Определите строение соединения состава $C_4H_{10}O$ по ИК- и ПМР-спектрам, представленным на рисунках:



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 *para*-положение нитрогруппы? Предскажите область химических сдвигов протонов групп CH_3 и NH и мультиплетность этих сигналов.

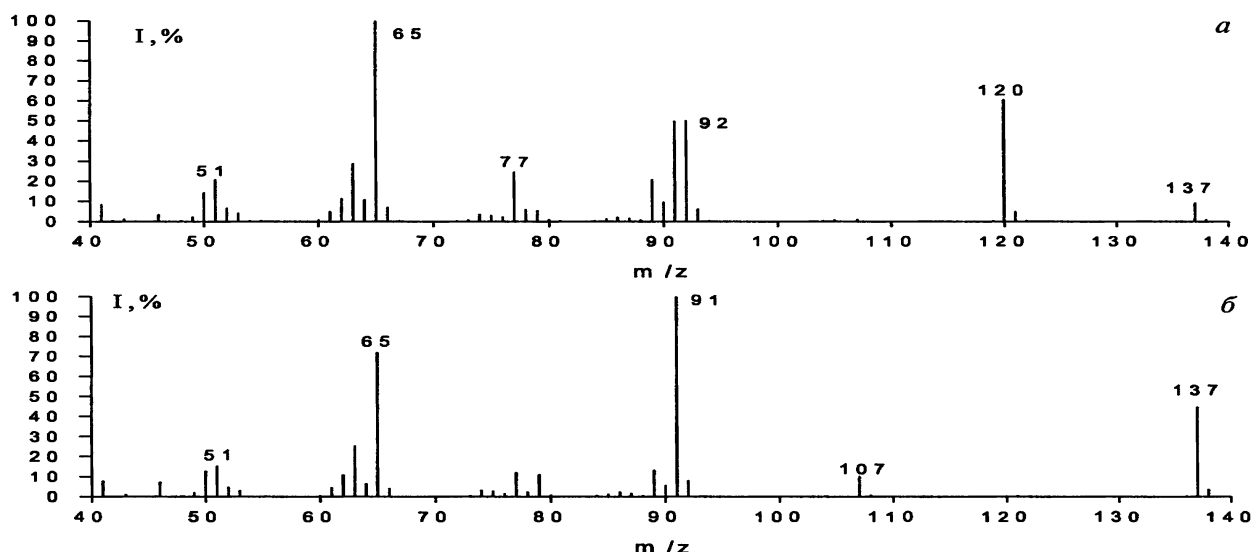


2. Зависимость химического сдвига от индукционного эффекта.

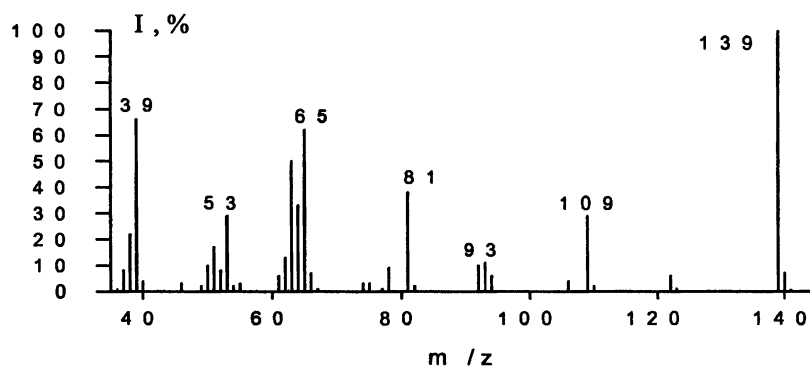
Контрольная работа №4

Вариант 1.

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

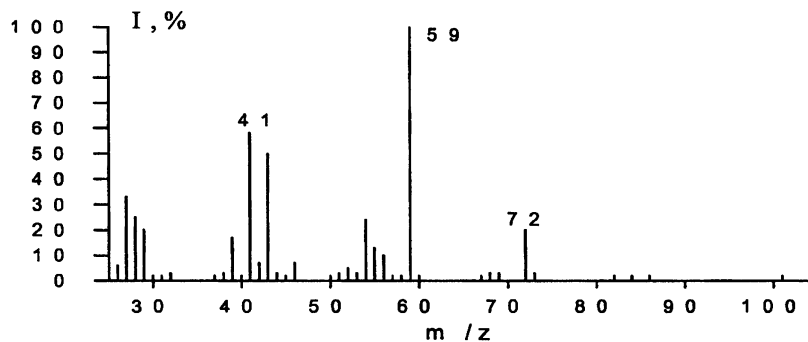


2. Объясните образование ионов с m/z 122, 109, 94, 93, 92, 81, 65 и составьте схему распада M^+ о-аминофенола

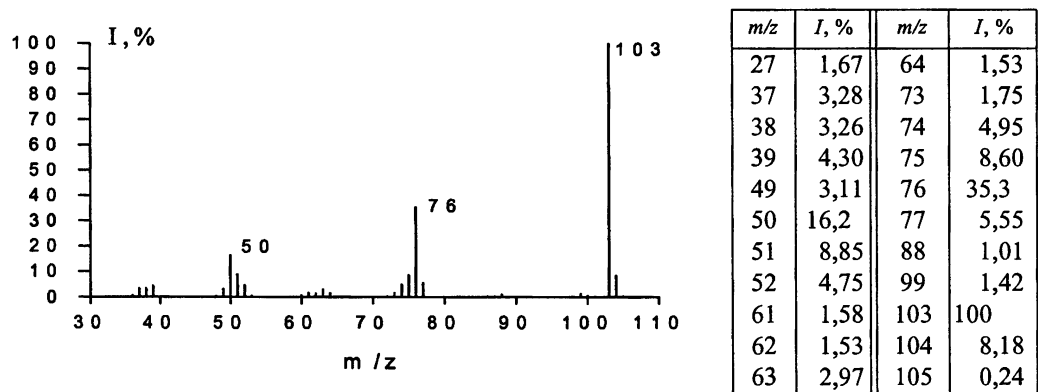


Вариант 2

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

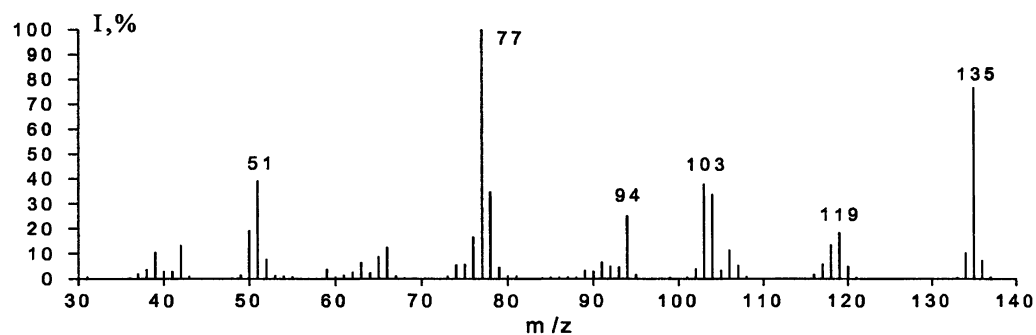


2. Идентифицируйте соединение по спектру электронного удара

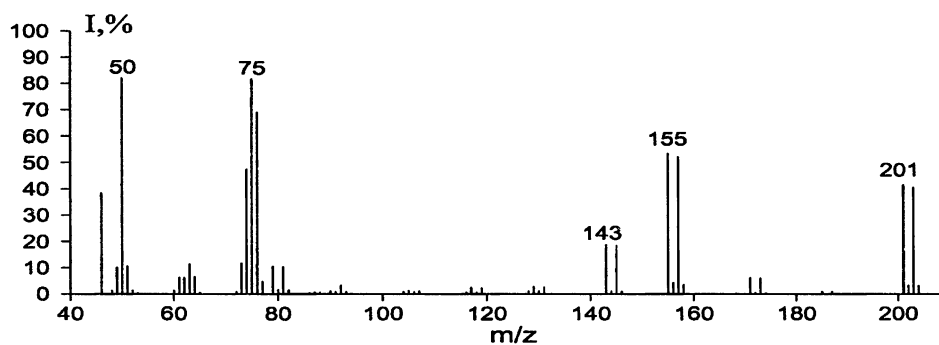


Вариант 3.

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

- Какие органические растворители применяют в ИК-спектроскопии: а/ толуол; б/ бензол; в/ четыреххлористый углерод; г/ ацетон;
- Деформационные колебания обусловлены:
 - изменением углов между связями;
 - изменением длины связей;
 - переходом электронов с низшей занятой молекулярной орбитали на высшую свободную молекулярную орбиталь;
 - экранированием валентными электронами соседних атомов при действии внешнего магнитного поля;
 - ионизацией нейтральных молекул.
- На каком из рисунков показаны симметричные деформационные колебания:

а	
б	
в	

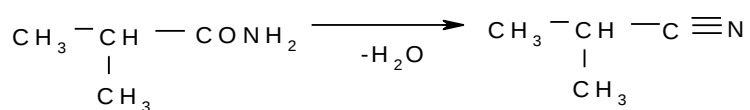
4. Резонанс Ферми это:

- 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 С-Н – 2962-2926 см^{-1} , 2872-2853 см^{-1} (асимметричные, симметричные),
деформационные С-Н – 1485-1430 см^{-1} , 1380-1340 см^{-1} (асимметричные, симметричные)

б/ свободные валентные О-Н 3650-3580 см^{-1} ;

в/ валентные С=О – 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

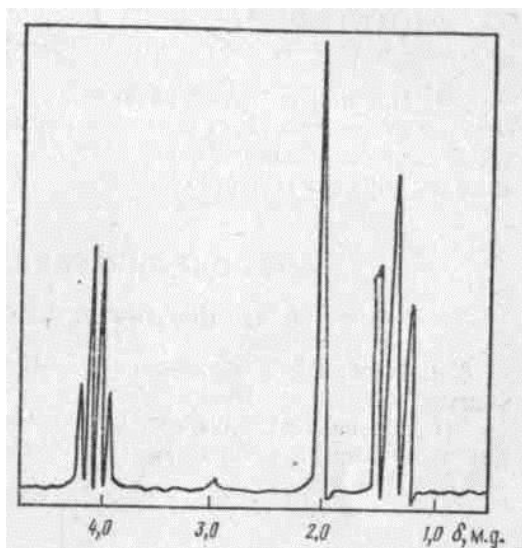
15. Экранирование протонов алифатических связей C-H в ряду CH_3 ; CH_2 ; CH :

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 $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2\text{Na}$.



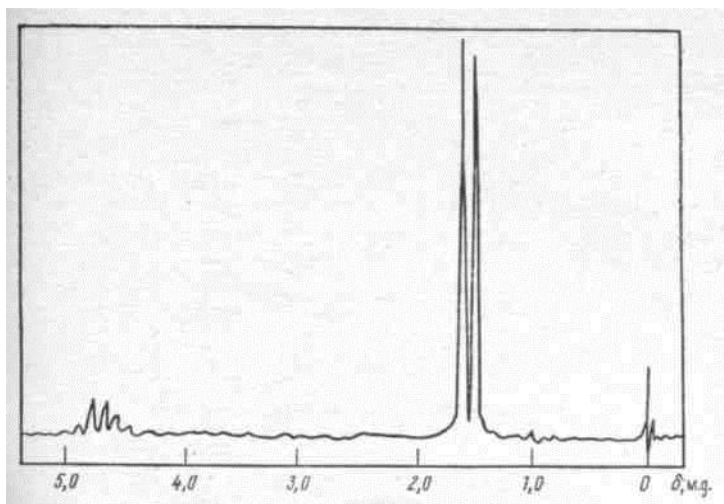
а/ уксусная кислота;

б/ этилацетат;

в/ метилацетат;

г/ пропионовый альдегид

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



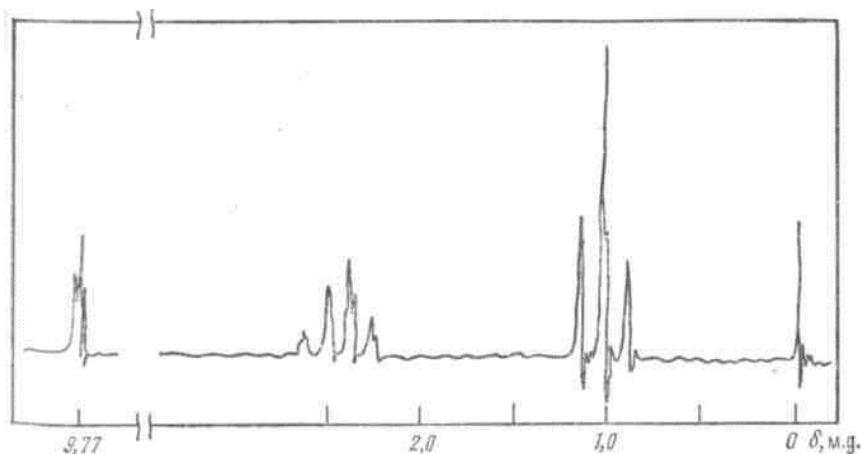
а/ 1-нитропропан;

б/ 2-аминопропан;

в/ 2-аминобутан.

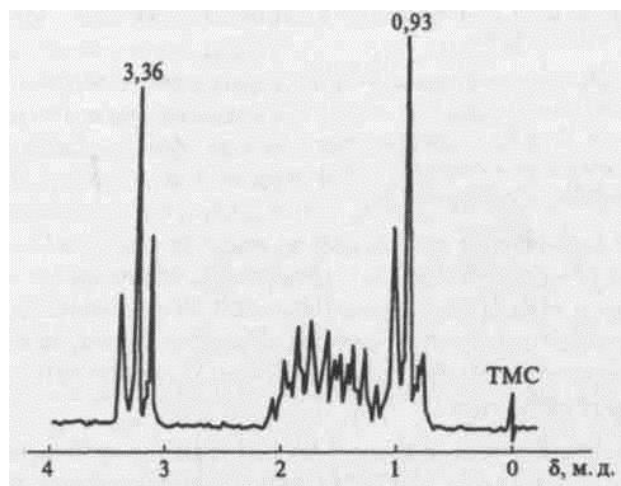
г/ 2-нитропропан;

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



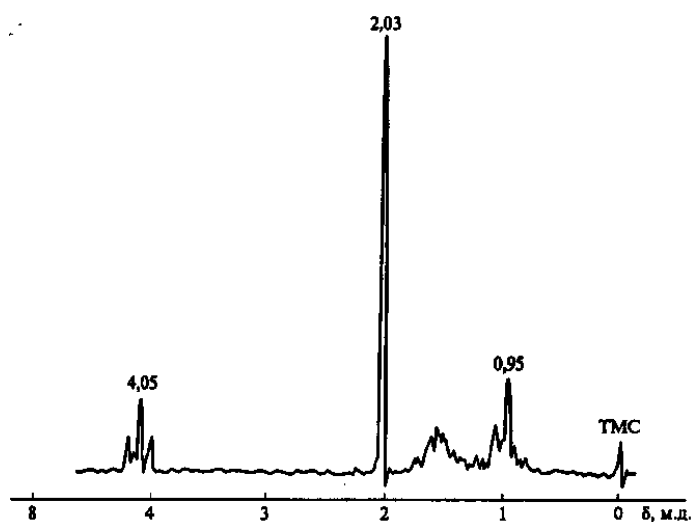
- а/ бутаналь;
- б/ пропионовый альдегид;
- в/ бензол;
- г/ гексан.

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.

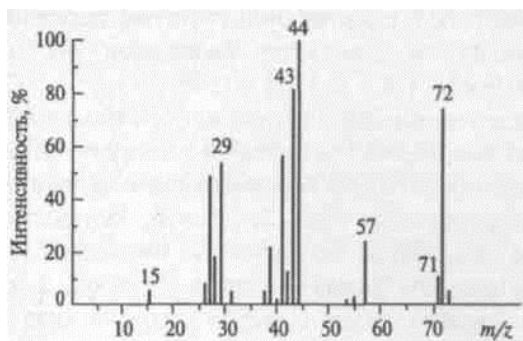
26. «Чётно-электронное» правило заключается в следующем:

- 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/ изопронил;
- 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;

36. Как математически выражается закон Бугера-Ламберта-Бера:

- а/ $A = \ln \frac{I_0}{I} = \varepsilon c l$;
- б/ $A = \lg \frac{I_0}{I} = \varepsilon \lambda l$;

$$B/A = \lg \frac{I_0}{I} = \varepsilon c l ;$$

$$Г/ A = \ln \frac{I_0}{I} = I_0 c l .$$

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_0/I от концентрации C ;
- в/ графика зависимости пропускания 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;
- б/ электроно-донорные заместители;
- б/ электроно-акцепторные заместители;

в/ электроно-донорные или электроно-акцепторные заместители.

43. При увеличении полярности растворителя как изменяется спектр поглощения:

а/ уменьшается интенсивность полосы поглощения;

б/ полоса поглощения смещается в длинноволновую область;

в/ увеличивается интенсивность полосы поглощения;

г/ исчезает колебательная структура.

44. Низкая интенсивность полос поглощения альдегидов и кетонов обусловлена тем, что:

а/ переход $\sigma \rightarrow \sigma^*$ является запрещенным по симметрии;

б/ переход $n \rightarrow \sigma^*$ является запрещенным по симметрии;

в/ переход $\pi \rightarrow \pi^*$ является запрещенным по симметрии;

г/ переход $n \rightarrow \pi^*$ является запрещенным по симметрии.

45. Почему максимум полосы поглощения сопряженной системы находится в более длинноволновой области по сравнению с изолированной π -связью:

а/ для перехода $\pi \rightarrow \pi^*$ в сопряженных системах с ВЗМО на НСМО требуется меньшая энергия, чем для $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода в изолированной π -связи;

б/ для перехода $\pi \rightarrow \pi^*$ в сопряженных системах с ВЗМО на НСМО требуется большая энергия, чем для $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода в изолированной π -связи;

в/ для перехода $\pi \rightarrow \pi^*$ в сопряженных системах с НСМО на ВЗМО требуется меньшая энергия, чем для $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода в изолированной π -связи;

г/ для перехода $\pi \rightarrow \pi^*$ в сопряженных системах с НСМО на ВЗМО требуется большая энергия, чем для $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода в изолированной π -связи.

46. Какие три полосы поглощения характерны для бензола:

а/ 150, 180, 250-270;

б/ 100, 120, 200-210;

в/ 180, 204, 230-260 нм;

г/ 200, 210, 240-250.

47. Чем отличаются спектры *цис*- и *транс*-изомеров:

а/ *транс*-изомеры имеют более коротковолновые полосы поглощения $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода с большей интенсивностью по сравнению с *цис*-изомерами;

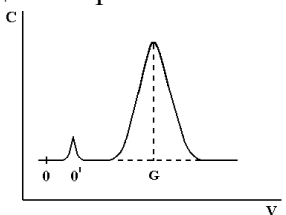
б/ *транс*-изомеры имеют более длинноволновые полосы поглощения $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода с меньшей интенсивностью по сравнению с *цис*-изомерами;

в/ *транс*-изомеры имеют более длинноволновые полосы поглощения $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода с большей интенсивностью по сравнению с *цис*-изомерами;

г/ *транс*-изомеры имеют более коротковолновые полосы поглощения $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода с меньшей интенсивностью по сравнению с *цис*-изомерами.

Таблица 9 - Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ПК-3 Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного				

происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам.				
1.	Задания открыто	Как называется кривая изображенная на рисунке? Условия ее детектирования? 	Если поток газа-носителя, содержащий десорбированное вещество, проходит через чувствительный элемент прибора, фиксирующего мгновенное изменение концентрации вещества в газе (детектор), то на записывающем устройстве этого прибора получается кривая, называемая хроматографическим пиком или кривой элюирования.	2
2		Что такое время удерживания и из каких составляющие в него входят?	Время от момента ввода анализируемой пробы до регистрации максимума пика называют <i>временем удерживания</i> (элюирования) t_R. (отрезок OG на графике). Время удерживания складывается из двух составляющих – времени пребывания вещества в подвижной и неподвижной фазах	2
3		Одна из основных задач газовой хроматографии состоит в том, чтобы получить хорошее разделение. Для оценки хроматографического разделения компонентов пользуются тремя группами критериев. Назовите компоненты первой группы критериев.	степень разделения α_{21} критерий селективности жидкой фазы K_C	1
4		Продолжите фразу: Если растворимость пробы выше в неподвижной фазе, то ...	время удерживания компонентов значительно возрастает	2
5		Продолжите предложение: Если растворимость пробы выше в подвижной фазе, то ...	время удерживания может быть близким к времени удерживания несорбируемого компонента	2
ПК-3 Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам.				
1	Задания закрыто	Длина участка колонки, на которой	1	1

	о типа	достигается состояние равновесия между концентрацией вещества в подвижной и неподвижной фазах, называется: 1. высотой, эквивалентной теоретической тарелке 2. высотой вихревой диффузии 3. высотой Ван-Деемтера		
2		В каких случаях вихревая диффузия уменьшается: 1. частицы твердого сорбента имеют одинаковые размеры и правильную форму 2. колонка плотно упакована 3. уменьшение толщины слоя жидкости на твердом носителе	1, 2	2
3		Какие тонкодисперсные пористые материалы в качестве адсорбентов применяют в жидкостной колоночной хроматографии: 1. SiO_2 2. Al_2O_3 3. Толуол 4. бензол	1, 2	1
4		В каких случаях используют метод нормировки с поправочным коэффициентом: 1. чувствительность детектора различна по отношению к разделяемым компонентам смеси	1	1

		2. вещества, взятые в одинаковом количестве, дают одну и ту же площадь пика, независимо от их строения 3. экспериментальное определение зависимости высоты или площади пика от концентрации вещества		
5		Какое преимущество газа-носителя в колонках без наполнителя по сравнению с заполненными пористыми материалами в трубках с той же величиной сечения: 1. неподвижная фаза фиксирована на внутренней стенке капилляра в виде гомогенной жидкой пленки 2. распределение скоростей в потоке вязкой среды в трубке круглого сечения имеет параболический характер 3. сопровождается меньшими энергетическими потерями	3	2

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

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

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
Основной блок			
1.	Тема 1. Колебательная спектроскопия.	20	по расписанию
2.	Тема 2. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР.	20	по расписанию

3.	Тема 3. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР	20	по расписанию
4.	Тема 4. Масс-спектрометрия	20	по расписанию
5.	Тема 5. Электронная спектроскопия.	20	по расписанию
Всего		100	

Таблица 11 – Система штрафов (для одного занятия)

Показатель	Балл
Опоздание на занятие	5
Нарушение учебной дисциплины	10
Неготовность к занятию	10
Пропуск занятия без уважительной причины	20

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

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90-100	5 (отлично)	Зачтено
85-89	4 (хорошо)	
75-84		
70-74		
65-69		
60-64	3 (удовлетворительно)	Не зачтено
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1. Основная литература:

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

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений: Пер. с англ.- М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006.
2. Бакстон Ш., Робертс С. Введение в стереохимию органических соединений. От метана до макромолекул: Пер. с англ.- М.: Мир, 2005.
3. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. 493 с.
4. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ - М.:Мир, 1992.
5. Органическая химия: Учебник для вузов: В 2 кн./ В.Л.Белобородов, С.Э. Зурабян, А.П. Лузин, Н.А. Тюкавкина. – М.: Дрофа, 2003.
6. В.И. Сорокин «Идентификация органических соединений: элементный и функциональный анализ, исследование растворимости», Ростов-на-Дону. 2007. 45 с. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М.: Мир. 1992. 300 с.

7. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высшая школа. 1984. 336 с.
8. Заикин В.Г., Варламов А.В., Микая А.И., Простаков Н.С. Основы масс-спектрометрии органических соединений. М.: МАИК «Наука/Интерпериодика», 2001. – 286 с.
- в) Интернет-ресурсы: www.asu.edu.ru, <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/org.html>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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 законными 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).

Аудитория № 123 – лаборатория общей химии и химии высокомолекулярных соединений, (*учебный корпус № 2*). 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.