

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 30.10.2023 17:06:28  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной и методической работе

\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский

« 21 » февраля 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**ИДЕНТИФИКАЦИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ**  
**СОЕДИНЕНИЙ**

Направление подготовки

**04.04.01 Химия**

Направленность образовательной программы

**Синтетическая органическая химия**

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **химической и биотехнологии**

Кафедра **органической химии**

Санкт-Петербург

2023

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчик доцент		доцент Храмчихин А.В.

Рабочая программа дисциплины «Б1.В.04» обсуждена на заседании кафедры органической химии  
протокол от 23 января 2023 г. № 5

Заведующий кафедрой

М.Л. Петров

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии  
протокол от 06 февраля 2023 г. № 6

Председатель

М.В. Рутто

### СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки		М.Л. Петров
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З. Труханович
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	04
3. Объем дисциплины .....	05
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	05
4.2. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа.....	11
4.3.1. Семинары, практические занятия .....	11
4.4. Самостоятельная работа.....	12
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	12
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	12
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	14
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	15
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	15
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	16
10.2. Программное обеспечение.....	16
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	16
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	16
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	16

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы 04.04.01 магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине.

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
<b>ПК-1</b> Способен планировать исследование, выбирать методы решения поставленных задач и проводить научно-исследовательскую работу в области органической химии и смежных наук	<b>ПК-1.3</b> Способность использовать современные методы для анализа и доказательства строения органических веществ	<b>Знать:</b> современные методы установления и исследования состава и строения органических соединений <b>Уметь:</b> проводить качественный и количественный анализ органических соединений с использованием химических и физико-химических методов анализа, соотносить свойства органического соединения с его структурой, подбирать алгоритм идентификации органических соединений <b>Владеть:</b> современными методиками определения физико-химических свойств и установления структуры основных классов органических соединений

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы<sup>1</sup>.

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.04), и изучается на 1 курсе во 2 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Методы тонкого органического синтеза», «Методы разделения и очистки органических соединений».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Идентификация и определение строения органических соединений» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Химия гетероциклических соединений», «Химия элементоорганических соединений», «Дополнительные главы органической химии», в научно-исследовательской работе и при выполнении выпускной квалификационной работы.

<sup>1</sup> Место дисциплины будет учитываться при заполнении таблицы 1 в Приложении 1 (Фонд оценочных средств)

### 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>56</b>
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	36 (2)
лабораторные работы	–
курсовое проектирование (КР или КП)	–
КСР	2
другие виды контактной работы	
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>52</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	Устный опрос
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	зачет

### 4. Содержание дисциплины.

#### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия	6	4	0	8	ПК-1	ПК-1.3
2.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	6	8	0	12	ПК-1	ПК-1.3
3.	Колебательная спектроскопия	3	4	0	6	ПК-1	ПК-1.3

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
4.	Электронная спектроскопия	3	2	0	6	ПК-1	ПК-1.3
5.	Комплексное использование физико-химических методов анализа		18	0	20	ПК-1	ПК-1.3

#### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	<b>Краткие сведения о масс-спектрометрии.</b> Образование и вид масс-спектра. Молекулярные ионы, многозарядные и метастабильные ионы. Элементный состав ионов. Принципиальная схема масс-спектрометра. Системы напуска: холодный ввод, горячий ввод, прямой ввод. Хромато-масс-спектрометрия. Методы ионизации: электронная ионизация, фотоионизация, ионизация полем, полевая десорбция, химическая ионизация, электроспрей, лазерная десорбция, химическая ионизация при атмосферном давлении. Разделение ионов: электрический, магнитный, квадрупольный, времяпролетный анализаторы, ионная ловушка. Масс-спектрометры с двойной фокусировкой. Основные характеристики масс-спектрометра: разрешающая способность, массовая область, способ развертки масс-спектра. Способы регистрации и представления масс-спектров.	2	Л
1	<b>Краткие сведения о масс-спектрометрии.</b> Энергетическое состояние ионов, образующихся при ионизации. Принцип Франка-Кондона, адиабатический потенциал ионизации. Основное и электронно-возбужденные состояния молекулярного иона. Процессы перегруппировки в масс-спектрометрии. Влияние различных методов ввода и ионизации на вид масс-спектра. Модификация масс-спектра. Способы повышения летучести соединений. Метод хромато-масс-спектрометрии. Стыковка масс-спектрометра с хроматографом. Информация, получаемая в методе хромато-масс-спектрометрии.	2	Л

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	<p><b>Обработка и анализ масс-спектра.</b>  Расшифровка масс-спектров. Стабильные изотопы и вычисление интенсивностей изотопных пиков. Определение молекулярного веса и элементного состава соединения по масс-спектру низкого разрешения. Определение элементного состава по масс-спектру низкого и высокого разрешения. Формальная ненасыщенность. Применение масс-спектрометрии для решения структурных задач органической химии. Функциональные группы, характеристические потери и пики. Анализ масс-спектров с помощью компьютерных программ. Методы определения содержания изотопной метки в соединениях, меченных стабильными изотопами.</p>	2	Слайд-презентация
2	<p><b>Ядерный магнитный резонанс.</b>  Место ЯМР среди других физических методов исследования органических соединений. Области применения. История метода. Приборы и оборудование. Магнит, датчик, ампулы. Блок-схема спектрометра ЯМР. Эксперимент. Пробоподготовка. Дейтерорастворители. Лок. Основы теории ЯМР-спектроскопии, спиновое состояние ядер, поведение магнитного момента во внешнем магнитном поле. Магнитные свойства ядер. Эффект Зеемана. Уравнение резонанса. Резонанс в макроскопическом объеме. Случай непопадания в резонанс. Ситуация нескольких магнитных моментов. Спиновое эхо. Уравнение Блоха. Спектр. Продольная релаксация. Поперечная релаксация. Время релаксации. Механизмы релаксации. Скалярное взаимодействие. Инвариантность мультиплетности. Номенклатура спиновых систем. Двухспиновые системы АВ и АХ. Скалярное взаимодействие с квадрупольными ядрами. Ядерный эффект Оверхаузера.</p>	2	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
2	<p><b>Особенности эксперимента ЯМР.</b>            Временное и частотное представление спектра. Принципы импульсной ЯМР-спектроскопии с Фурье-преобразованием. Спад свободной индукции (ССИ). Оцифровка сигнала. Частота сигнала. Цифровое разрешение. Динамический диапазон АЦП. Соотношение сигнал/шум. Операции с ССИ. Аподизация. Линейное предсказание. Дополнение нулями. Методология обработки спектра. Понятие об основных параметрах: химический сдвиг, единицы измерения хим. сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Интенсивность сигналов. Внутренние и внешние стандарты. Факторы, определяющие хим. сдвиги: а) Влияние электронной плотности на ядре, б) влияние электронной плотности на соседних атомах в) Магнитная анизотропия атомов и групп, г) влияние водородных связей, д) эффекты растворителя. Спектр. Информация, содержащаяся в файлах, полученных на приборах фирмы Bruker.</p>	2	Слайд-презентация
2	<p><b>Спектроскопия ЯМР на ядрах <math>^1\text{H}</math>, <math>^{13}\text{C}</math>, <math>^{19}\text{F}</math>, <math>^{31}\text{P}</math> и др.</b>  <i>Ядра <math>^1\text{H}</math>.</i>            Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны химсдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов алифатических соединений, олефинов, замещенных бензолов.            Спин-спиновое взаимодействие и химическое строение: а) геминальные КССВ, б) вицинальные КССВ, в) дальние КССВ. Уравнение Карплуса. Химическая и магнитная эквивалентность ядер. Уточнение параметров спектра. Симуляция. Экспериментальные методы спектроскопии <math>^1\text{H}</math>-ЯМР. Специальные экспериментальные методы в спектроскопии ЯМР. Методы упрощения спектров, подавление, преднасыщение, двойной резонанс, сдвигающие реагенты (шифт-реагенты). Проблемы исследования конформаций. Обменные процессы в спектрах ЯМР: а) внутренняя динамика органических молекул, б) межмолекулярные обменные процессы.</p>	2	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
	<p><i>Ядра <sup>13</sup>C.</i>            Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны хим. сдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов замещенных бензолов. Константы спин-спинового взаимодействия. Экспериментальные методы спектроскопии <sup>13</sup>C-ЯМР. Ядерный эффект Оверхаузера. 1D. Спектр <sup>13</sup>C с подавлением ССВ по протонам Broad Band (BB). Спектр <sup>13</sup>C с частичным подавлением ССВ по протонам (Off-resonance). Спектр <sup>13</sup>C без подавления ССВ. Спектр <sup>13</sup>C J-модулированного спинового эхо (JMOD). C-H корреляция на ближних КССВ. C-H корреляция на дальних КССВ. Инверсная спектроскопия. C-C корреляции.</p> <p><i>Спектроскопия ЯМР на ядрах <sup>31</sup>P.</i>  <i>Спектроскопия ЯМР на ядрах N.</i>  <i>Спектроскопия ЯМР на ядрах <sup>19</sup>F.</i>  <i>Двумерная спектроскопия ЯМР.</i></p>		Слайд-презентация
3	<p><i>Инфракрасные спектры.</i>            История метода. Приборы. Источники и приемники ИК излучения. Материалы, используемые в ИК-области спектра. Блок-схема и принцип работы двухлучевого спектрофотометра. Техника приготовления образцов для анализа. Растворители. Физические основы метода. Инфракрасные спектры двухатомных молекул. Гармонический и ангармонический осцилляторы. Силовая постоянная. Изотопное замещение. Интенсивность поглощения. Правила отбора. Форма инфракрасных полос поглощения. Колебание многоатомных молекул. Нормальные колебания нелинейных и линейных молекул. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы. Резонанс Ферми. Характеристичность частот в колебательных спектрах молекул. Область функциональных групп и область “отпечатков пальцев”. Применение ИК-спектров для идентификации органических соединений. Атласы и каталоги инфракрасных спектров. Структурный анализ по характеристическим частотам. Корреляционные диаграммы характеристических частот. Межмолекулярные эффекты и характеристические частоты групп.</p>	3	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
	<p>Влияние растворителя и концентрации. Влияние внутримолекулярных факторов на характеристические частоты групп. Влияние растворителя и концентрации. Влияние внутримолекулярных факторов на характеристические частоты групп: напряжение цикла и стерические эффекты, электронные эффекты и сопряжение, дипольное и трансаннулярное взаимодействие (эффект поля), внутримолекулярная водородная связь (ВС). Различие внутри- и межмолекулярной ВС. Влияние ВС на полосы поглощения группы донора и группы акцептора протона. Оценка энергии ВС. Особенности ИК-спектров важнейших классов органических соединений.</p> <p>многокомпонентных растворов.</p> <p><i>Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС).</i></p> <p>Природа явления. Аппаратура для получения спектров КРС. Интенсивность полос в спектрах КРС. Сравнительная характеристика ИК- и КРС-спектров. Люминесценция.</p>		
4	<p><i>Электронная спектроскопия или спектроскопия УФ- и видимого диапазона.</i></p> <p>Электронные уровни энергии органических соединений. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Особенности ультрафиолетовых и видимых спектров поглощения. Принципиальная схема спектрофотометра и приготовление образца. Поглощение органических соединений. Понятие о хромофоре и ауксохроме. Классификация электронных состояний и переходов. Типы полос поглощения. Влияние растворителя: положительная и отрицательная сольватохромия. Поглощение ауксохромных групп и простых хромофорных групп. Сопряженные хромофоры: диены, <math>\alpha,\beta</math>-ненасыщенные карбонильные соединения, полиины и др. Правила Вудворда-Физера. Бензоидные и гетероароматические соединения.</p> <p>Пространственные внутри- и межмолекулярные эффекты в электронных спектрах. Основные типы задач, решаемых с помощью УФ-спектроскопии для установления строения молекул. Количественные анализ по электронным спектрам поглощения.</p>	3	Л

### 4.3. Занятия семинарского типа.

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
1	Задачи по определению элементного состава соединения по масс-спектру низкого и высокого разрешения. Анализ масс-спектров смеси соединений. Расчет содержания изотопной метки. Задачи по определению строения неизвестного соединения по его масс-спектру. Работа с хромато-масс-спектрограммами, выяснение количественного и качественного состава анализируемого образца. Обработка масс-спектра для его представления в графическом и табличном виде. Определение элементного состава неизвестного образца, выданного студенту в виде масс-спектра, получение сведений о его строении.	4	2	МГ
2	Ознакомление студентов с принципами решения задач по ядерному магнитному резонансу (расчету параметров спектра, отнесения резонансных сигналов, сборка молекулы по структурным фрагментам). Самостоятельное решение задач по спектроскопии протонного магнитного резонанса. Анализ спектров ЯМР $^{13}\text{C}$ , $^{19}\text{F}$ и $^{31}\text{P}$ . Определение параметров спектров. Самостоятельное решение задач с использованием двумерных спектров. Ознакомление с компьютерным ПО для обработки спектров ЯМР	8		МШ
3	Знакомство с корреляционными таблицами частот в колебательных спектрах и их приложением к интерпретации спектров. Решение задач по интерпретации: ИК-спектров с помощью корреляционных таблиц. Решение индивидуальных задач по интерпретации ИК-спектров. Установление строения неизвестных соединений по их ИК-спектрам.	4		КтСм

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновац ионная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
4	Вычисление длины волны, волнового числа и коэффициента молярной экстинкции из УФ-спектров. Закон Ламберта-Бера. Решение задач по использованию УФ-спектров в структурных исследованиях. Решение задач на правило Вудворда-Физера. Влияние сопряжения, замещения, растворителя, процессов протонирования-депротонирования на УФ-спектры.	2		КрСт
5	Решение задач с использованием всех или нескольких физико-химических методов.	18		МШ

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия	8	Устный опрос
2	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	12	Устный опрос
3	Колебательная спектроскопия	6	Устный опрос
4	Электронная спектроскопия	6	Устный опрос
5	Комплексное использование физико-химических методов анализа. Решение задач	20	Устный опрос

#### 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медиа: <http://media.technolog.edu.ru>

#### 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета (2 семестр).

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачет предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков). При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

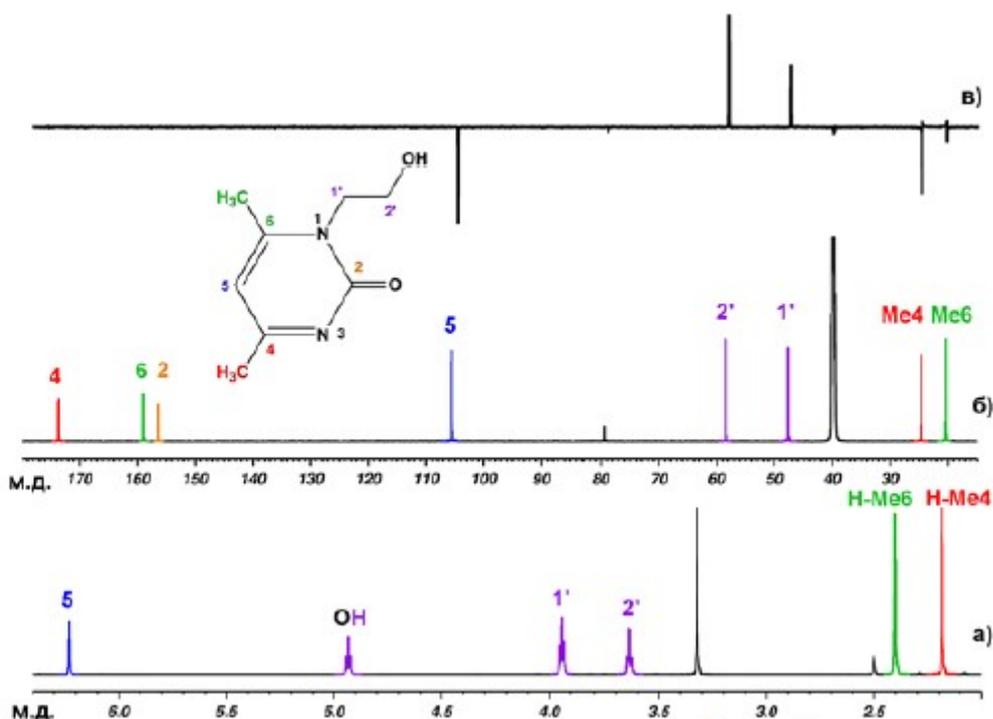
Пример варианта вопросов на зачете:

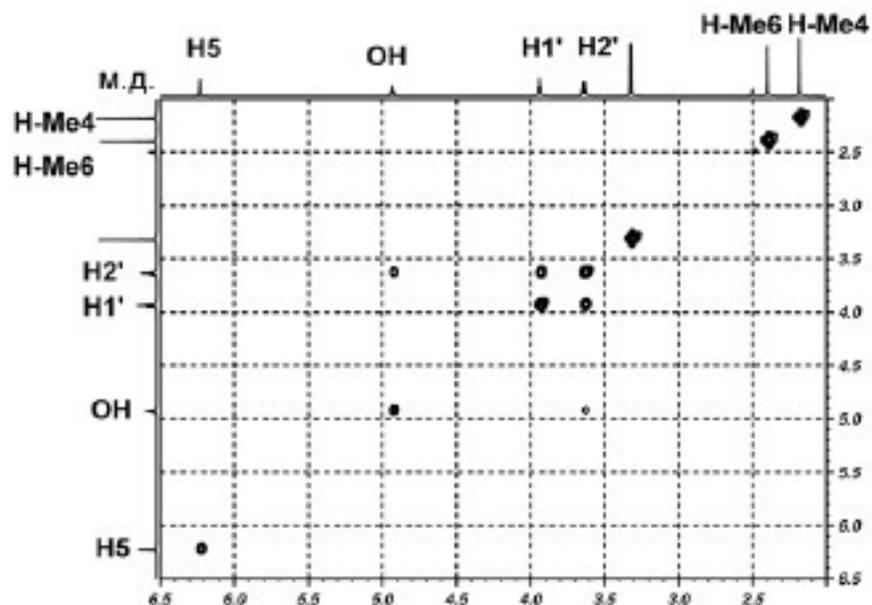
#### Вариант № 1

1. Образование и вид масс-спектра. Молекулярные ионы, многозарядные и метастабильные ионы. Элементный состав ионов. Принципиальная схема масс-спектрометра. Системы напуска: холодный ввод, горячий ввод, прямой ввод.
2. Характеристики ядра  $^{13}\text{C}$ . Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны химсдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов замещенных бензолов. Константы спин-спинового взаимодействия.

Пример задачи:

Ниже на рисунке приведена структура ксемидона и его спектры ЯМР  $^1\text{H}$  (а),  $^{13}\text{C}$  (б) и DEPT (в), а также спектр  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY в ДМСО при 300 К. Проанализируйте приведенные спектры и сделайте вывод о корреляции протонов.





Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

## 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

### а) печатные издания:

1. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2011 - Ч. 1 : Общие вопросы спектроскопии. - 5-е изд. - 2011. - 236 с. : ил. - Библиогр.: с. 204-226. - ISBN 978-5-397-01833-3.
2. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2007 - 2009. - Ч. 2 : Атомная спектроскопия. - 5-е изд. - 2009. - 415 с. : ил. - Библиогр.: с. 204-226. - ISBN 978-5-397-00110-6.
3. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2007 - 2009. - Ч. 3 : Молекулярная спектроскопия. - 5-е изд. - 2009. - 527 с. : ил. - Библиогр.: с. 492-513. - ISBN 978-5-397-00055-0.
4. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл ; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. в конце глав. - ISBN 978-5-94774-392-0.
5. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков: Учебник для химических спец. вузов / Ю. М. Воловенко, В. Г. Карцев, И. В. Комаров и др. - М. : ICSPF PRESS, 2011. - 694 с. : ил. - Библиогр.: с. 680. - ISBN 978-5-903078-34-9.

### б) электронные издания

6. Краснокутская, Е. А. Спектральные методы исследования в органической химии : учебное пособие / Е. А. Краснокутская, В. Д. Филимонов. — Томск : ТПУ, [б. г.]. — Часть II : ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия — 2013. — 88 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/45172> (дата обращения: 28.12.2022). — Режим доступа: по подписке.
7. Ищенко, А. А. Масс-спектрометрия : учебное пособие / А. А. Ищенко, А. А. Гречников, А. А. Перов. — Москва : РТУ МИРЭА, 2021. — 80 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/218513> (дата обращения: 28.12.2022). — Режим доступа: по подписке.

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

учебный план, РПД и учебно-методические материалы:  
<http://media.technolog.edu.ru>

общие поисковые системы: [www.google.ru](http://www.google.ru),

специальные поисковые системы, сайт МГУ им. Ломоносова:  
<http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>,

учебные и методические интерактивные программные средства для самостоятельных занятий (домашних работ) студентов размещены в интернете на домашней странице кафедры по адресу: <http://www1.lti-gti.ru/orgchem/>,

электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине «Идентификация и определение строения органических соединений» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2014. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний по уже изученному материалу.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций,

поиск научной информации по органическим соединениям,

взаимодействие с обучающимися с помощью ЭИОС.

### **10.2. Программное обеспечение.**

Microsoft Office (Microsoft Excel);

MDL ISIS Draw 2.5 редактор структурных химических формул,

Пакет программ ACD/Lab, ACDFree 12 редактор структурных химических формул, расчет физико-химических и спектральных свойств органических соединений, информационная научная база данных по химическим соединениям [www.reaxys.com](http://www.reaxys.com).

### **10.3. Базы данных и информационные системы**

Справочно-поисковая система "Chemnet", химического факультета Московского Государственного университета. [www.chem.msu.ru/rus/elibrary/](http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/)

### **11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория 3 50.0 кв.м. Ноутбук Toshiba L40, мультимедийный проектор Benq MP 511+, экран. Компьютерный класс 50 кв.м., оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть ПК 8 шт.

### **12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014г.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Идентификация и определение строения органических соединений»  
1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

<b>Компетенции</b>		
<b>Индекс</b>	<b>Формулировка<sup>2</sup></b>	<b>Этап формирования<sup>3</sup></b>
ПК-1	Способен планировать исследование, выбирать методы решения поставленных задач и проводить научно-исследовательскую работу в области органической химии и смежных наук	промежуточный

<sup>2</sup> **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты)

<sup>3</sup> этап формирования компетенции выбирается по п.2 РПД и учебному плану (начальный – если нет предшествующих дисциплин, итоговый – если нет последующих дисциплин (или компетенция не формируется в ходе практики или ГИА), промежуточный - все другие.)

## 2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
<b>ПК-1.3</b> Способность использовать современные методы для анализа и доказательства строения органических веществ	<b>Знает</b> современные методы установления и исследования состава и строения органических соединений	Правильные ответы на вопросы №1–36 к зачету	Отвечает на вопросы с ошибками подсказками преподавателя	Отвечает на вопросы с небольшими ошибками	Отвечает на вопросы без ошибок и без подсказки преподавателя.
	<b>Умеет</b> проводить качественный и количественный анализ органических соединений с использованием химических и физико-химических методов анализа, соотносить свойства органического соединения с его структурой, подбирать алгоритм идентификации органических соединений	Умеет подбирать алгоритм идентификации органических соединений с помощью физико-химических методов анализа	Подбирает алгоритм идентификации органических соединений с помощью физико-химических методов анализа с ошибками подсказками преподавателя	Подбирает алгоритм идентификации органических соединений с помощью физико-химических методов анализа с небольшими ошибками	Правильно подбирает алгоритм идентификации органических соединений с помощью физико-химических методов анализа

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	<b>Владеет</b> современными методиками определения физико-химических свойств и установления структуры основных классов органических соединений	Интерпретирует спектральные данные исходя из структуры заданного соединения	Интерпретирует спектральные данные исходя из структуры заданного соединения частично или с ошибками	Интерпретирует спектральные данные исходя из структуры заданного соединения с незначительными ошибками	Без ошибок интерпретирует спектральные данные исходя из структуры заданного соединения

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):  
по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, шкала оценивания – «зачтено», «не зачтено» .

### **3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.**

#### **3.1. Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-1:**

1. Образование и вид масс-спектра. Молекулярные ионы, многозарядные и метастабильные ионы. Элементный состав ионов. Принципиальная схема масс-спектрометра. Системы напуска: холодный ввод, горячий ввод, прямой ввод.

2. Хромато-масс-спектрометрия. Методы ионизации: электронная ионизация, фотоионизация, ионизация полем, полевая десорбция, химическая ионизация, электроспрей, лазерная десорбция, химическая ионизация при атмосферном давлении. Разделение ионов: электрический, магнитный, квадрупольный, времяпролетный анализаторы, ионная ловушка. Масс-спектрометры с двойной фокусировкой.

3. Основные характеристики масс-спектрометра: разрешающая способность, массовая область, способ развертки масс-спектра. Способы регистрации и представления масс-спектров.

4. Энергетическое состояние ионов, образующихся при ионизации. Принцип Франка-Кондона, адиабатический потенциал ионизации. Основное и электронно-возбужденные состояния молекулярного иона. Процессы перегруппировки в масс-спектрометрии.

5. Влияние различных методов ввода и ионизации на вид масс-спектра. Модификация масс-спектра. Способы повышения летучести соединений. Метод хромато-масс-спектрометрии. Стыковка масс-спектрометра с хроматографом. Информация, получаемая в методе хромато-масс-спектрометрии. Современное состояние методов масс-спектрометрии и хромато-масс-спектрометрии.

6. Место ЯМР среди других физических методов исследования органических соединений. Области применения. История метода. Приборы и оборудование. Магнит, датчик, ампулы. Блок-схема спектрометра ЯМР. Эксперимент. Пробоподготовка. Дейтерорастворители.

7. Основы теории ЯМР-спектроскопии, спиновое состояние ядер, поведение магнитного момента во внешнем магнитном поле. Магнитные свойства ядер. Эффект Зеемана. Уравнение резонанса. Резонанс в макроскопическом объеме. Случай непопадания в резонанс. Ситуация нескольких магнитных моментов. Спиновое эхо. Уравнение Блоха.

8. Спектр. Продольная релаксация. Поперечная релаксация. Время релаксации. Механизмы релаксации. Скалярное взаимодействие. Инвариантность мультиплетности. Номенклатура спиновых систем. Двухспиновые системы АВ и АХ. Скалярное взаимодействие с квадрупольными ядрами. Ядерный эффект Оверхаузера. Временное и частотное представление спектра.

9. Принципы импульсной ЯМР-спектроскопии с Фурье-преобразованием. Спад свободной индукции (ССИ). Оцифровка сигнала. Частота сигнала. Цифровое разрешение. Динамический диапазон АЦП. Соотношение сигнал/шум. Операции с ССИ. Аподизация. Линейное предсказание. Дополнение нулями.

10. Методология обработки спектра. Понятие об основных параметрах: химический сдвиг, единицы измерения хим. сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Интенсивность сигналов. Внутренние и внешние стандарты. Факторы, определяющие хим. сдвиги: а) влияние электронной плотности на ядре, б) влияние электронной плотности на соседних атомах в) Магнитная анизотропия атомов и групп, г)

- влияние водородных связей, д) эффекты растворителя. Спектр. Информация, содержащаяся в файлах, полученных на приборах фирмы Bruker.
11. Характеристики ядра  $^1\text{H}$ . Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны химсдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов алифатических соединений, олефинов, замещенных бензолов. Спин-спиновое взаимодействие и химическое строение: а) геминальные КССВ, б) вицинальные КССВ, в) дальние КССВ. Уравнение Карплуса. Химическая и магнитная эквивалентность ядер. Уточнение параметров спектра. Симуляция.
  12. Экспериментальные методы спектроскопии  $^1\text{H}$ -ЯМР. Специальные экспериментальные методы в спектроскопии ЯМР. Методы упрощения спектров, подавление, преднасыщение, двойной резонанс, сдвигающие реагенты (шифт-реагенты).
  13. Проблемы исследования конформаций. Обменные процессы в спектрах ЯМР: а) внутренняя динамика органических молекул, б) межмолекулярные обменные процессы.
  14. Характеристики ядра  $^{13}\text{C}$ . Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны химсдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов замещенных бензолов. Константы спин-спинового взаимодействия.
  15. Экспериментальные методы спектроскопии  $^{13}\text{C}$ -ЯМР. Ядерный эффект Оверхаузера. 1D. Спектр  $^{13}\text{C}$  с подавлением ССВ по протонам Broad Band (BB). Спектр  $^{13}\text{C}$  с частичным подавлением ССВ по протонам (Off-resonance). Спектр  $^{13}\text{C}$  без подавления ССВ. Спектр  $^{13}\text{C}$  J-модулированного спинового эхо (JMOD). C-H корреляция на ближних КССВ. C-H корреляция на дальних КССВ. Инверсная спектроскопия. C-C корреляции.
  16. История метода инфракрасной спектроскопии. Приборы. Источники и приемники ИК излучения. Материалы, используемые в ИК-области спектра. Блок-схема и принцип работы двухлучевого спектрофотометра. Техника приготовления образцов для анализа. Растворители.
  17. Физические основы метода. Инфракрасные спектры двухатомных молекул. Гармонический и ангармонический осцилляторы. Силовая постоянная. Изотопное замещение. Интенсивность поглощения. Правила отбора. Форма инфракрасных полос поглощения. Колебание многоатомных молекул. Нормальные колебания нелинейных и линейных молекул. Валентные колебания, деформационные колебания, обертоны и комбинационные полосы. Резонанс Ферми.
  18. Характеристичность частот в колебательных спектрах молекул. Область функциональных групп и область "отпечатков пальцев". Применение ИК-спектров для идентификации органических соединений. Атласы и каталоги инфракрасных спектров. Структурный анализ по характеристическим частотам. Корреляционные диаграммы характеристических частот. Межмолекулярные эффекты и характеристические частоты групп.
  19. Влияние растворителя и концентрации. Влияние внутримолекулярных факторов на характеристические частоты групп: напряжение цикла и стерические эффекты, электронные эффекты и сопряжение, дипольное и трансаннулярное взаимодействие (эффект поля), внутримолекулярная водородная связь (ВС). Различие внутри- и межмолекулярной ВС. Влияние ВС на полосы поглощения группы донора и группы акцептора протона. Оценка энергии ВС.
  20. Особенности ИК-спектров важнейших классов органических соединений. Спирты, амины, парафины и циклопарафины, олефины, ацетилены, ароматические углеводороды, простые эфиры, карбоновые кислоты и сложные эфиры, нитрилы, нитросоединения, кетоны, альдегиды и т.д.
  21. Электронная спектроскопия или спектроскопия УФ- и видимого диапазона. Электронные уровни энергии органических соединений. Закон Бугера-Ламберта-Бера.

Особенности ультрафиолетовых и видимых спектров поглощения. Принципиальная схема спектрофотометра и приготовление образца.

22. Поглощение органических соединений. Понятие о хромофоре и ауксохроме. Классификация электронных состояний и переходов. Типы полос поглощения. Влияние растворителя: положительная и отрицательная сольватохромия.

23. Поглощение ауксохромных групп и простых хромофорных групп. Сопряженные хромофоры: диены,  $\alpha,\beta$ -ненасыщенные карбонильные соединения, полиины и др. Правила Вудворда-Физера. Бензойдные и гетероароматические соединения. Пространственные внутри- и межмолекулярные эффекты в электронных спектрах.

24. Основные типы задач, решаемых с помощью УФ-спектроскопии для установления строения молекул. Количественный анализ по электронным спектрам поглощения.

25. Физико-химические основы метода УФ-спектроскопии: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора

26. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров. Классификация полос поглощения в электронных спектрах

27. Цветность соединений, правила Вудворда-Физера, Степанова. Влияние растворителей в УФ-спектроскопии: батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты.

28. Физические основы метода ИК-спектроскопии: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул.

29. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.

30. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений.

31. Физические основы метода ЯМР-спектроскопии: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер.

32. Спектроскопия  $^1\text{H}$  ЯМР: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия  $J_{\text{HH}}$ .

33. Спектроскопия  $^{13}\text{C}$  ЯМР: шкала химических сдвигов ядер  $^{13}\text{C}$ , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия  $J_{\text{CH}}$ , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер  $^{13}\text{C}$  и протонов.

34. Физические основы метода масс-спектроскопии: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов.

35. Методы ионизации в масс-спектрометрии. Методы разделения и регистрации ионов.

36. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Масс-спектрометрические правила: азотное, "четно-электронное", затрудненный разрыв связей

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше, и задачу.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы – до 30 мин.

**4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.