

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 25.10.2023 16:21:35  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ  
Врио проректора по учебной  
и методической работе  
\_\_\_\_\_ Б.В. Пекаревский  
«24» апреля 2021\_г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИДЕНТИФИКАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ**  
**СОЕДИНЕНИЙ**

Направление подготовки

**18.04.01 Химическая технология**

Направленность программы магистратуры

**Химическая технология продуктов тонкого органического синтеза**

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**Очная**

**Факультет химической и биотехнологии**

**Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений**

Санкт-Петербург

2021

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

| Должность разработчика | Подпись | Ученое звание,<br>фамилия, инициалы |
|------------------------|---------|-------------------------------------|
| Доцент                 |         | Зиминов А.В.                        |

Рабочая программа дисциплины «Современные методы идентификации органических соединений» обсуждена на заседании кафедры химической технологии органических красителей и фототропных соединений  
протокол от «01»апреля 2021 № 4  
Заведующий кафедрой

С.М. Рамш

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии  
протокол от «20»апреля 2021 № 9

Председатель

М.В. Рутто

## СОГЛАСОВАНО

|   |  |                  |
|---|--|------------------|
| Руководитель направления подготовки<br>«Химическая технология»    |  | М.В. Рутто       |
| Директор библиотеки   |  | Т.Н. Старостенко |
| Начальник методического отдела<br>учебно-методического управления |  | Т.И. Богданова   |
| Начальник<br>учебно-методического управления                      |  | С.Н. Денисенко   |

## СОДЕРЖАНИЕ

|   |    |
|---|----|
| 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы ..... | 4  |
| 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы. ....   | 5  |
| 3. Объем дисциплины.....  | 5  |
| 4. Содержание дисциплины.....   | 6  |
| 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий. ....  | 6  |
| 4.2. Занятия лекционного типа. ....   | 6  |
| 4.3. Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия).....  | 9  |
| 4.3.1 Семинары, практические занятия. ....  | 9  |
| 4.3.2. Лабораторные занятия. ....   | 12 |
| 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....  | 13 |
| 4.5. Примерные темы курсовых проектов.....  | 14 |
| 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....  | 14 |
| 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации. ....   | 15 |
| 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины. ....  | 16 |
| 8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины. ....                            | 17 |
| 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....  | 17 |
| 10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. ....                          | 18 |
| 10.1. Информационные технологии.....  | 18 |
| 10.2. Программное обеспечение.....  | 18 |
| 10.3. Базы данных и информационные справочные системы. ....   | 19 |
| 11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы. ....                                 | 19 |
| 12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья. ....  | 22 |
| Приложение № 1 к рабочей программе дисциплины .....   | 23 |

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

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

| Код и наименование компетенции <sup>1</sup>  | Код и наименование индикатора достижения компетенции <sup>2</sup>   | Планируемые результаты обучения (дескрипторы) <sup>3</sup>   |
|--|---|--|
| ПК-1<br>Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при исследовании методов синтеза и свойств продуктов тонкого органического синтеза, органических красителей и фототропных соединений и синтетических БАВ | ПК-1.2<br>Определение сферы применения результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ по созданию материалов на основе органических красителей и синтетических БАВ | Знать:<br>существующие методы идентификации органических соединений, их особенности и области использования (ЗН-1);<br>Уметь:<br>расшифровывать спектры органических соединений (У-1);<br>Владеть:<br>навыками обработки полученной спектральной информации (Н-1).   |
| ПК-5<br>Организация аналитического контроля этапов разработки продуктов тонкого органического синтеза с заданными свойствами   | ПК-5.4<br>Организация внедрения разработанных технических решений производства продуктов тонкого органического синтеза  | Знать:<br>теоретические основы спектральных и хроматографических методов идентификации органических соединений (ЗН-1);<br>Уметь:<br>пользоваться справочными данными и базами данных, включая базы данных в сети Интернет, для анализа и интерпретации спектральных данных (У-1);<br>Владеть:<br>навыками обработки и визуализации спектральных данных для представления их в отчетах, научных презентациях и публикациях (Н-1). |

<sup>1</sup> Содержание и номер компетенции в точности соответствует ФГОС ВО и отображается в матрице компетенций для конкретной дисциплины

<sup>2</sup> Код индикатора присваивается руководителем направления подготовки, отображается в матрице компетенции и доводится разработчикам РПД. Повторение кодов индикаторов для конкретной компетенции, реализуемой разными дисциплинами, не допускается

<sup>3</sup> Дескрипторы переносятся из матрицы компетенций без смены формулировок

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Современные методы идентификации органических соединений» относится к дисциплинам по выбору части, формируемой участниками образовательных отношений<sup>4</sup> Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы магистратуры (Б1.В.ДВ.02.02) и изучается на 2 курсе в 4 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Современные проблемы химии и химической технологии», «Основы химической информатики», «Современные материалы и устройства на основе органических красителей и фототропных соединений».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Современные методы идентификации органических соединений» знания, умения и навыки необходимы в научно-исследовательской работе магистранта и при подготовке, выполнении и защите выпускной квалификационной работы, а также при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских, производственно-технологических, организационно-управленческих задач в будущей профессиональной деятельности.

## 3. Объем дисциплины.

| Вид учебной работы  | Всего,<br>ЗЕ/академ. часов |
|---|----------------------------|
| Общая трудоемкость дисциплины<br>(зачетных единиц/ академических часов) | 7 / 252                    |
| Контактная работа с преподавателем:                                     | 125                        |
| занятия лекционного типа  | 18                         |
| занятия семинарского типа, в т.ч.                                       | 98                         |
| семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)*   | 18 (4)                     |
| лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)               | 80 (40)                    |
| курсовое проектирование (КР или КП)                                     | 9                          |
| КСР   | -                          |
| другие виды контактной работы   | -                          |
| Самостоятельная работа  | 127                        |
| Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)                        | Устный опрос               |
| Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)                 | КП, Зачет                  |

<sup>4</sup> Определяется учебным планом

#### 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     | ИК спектроскопия   | 3                                      | 3                                       | -                   | 15                                   | ПК-1                    | ПК-1.2                 |
| 2     | УФ и люминесцентная спектроскопия                                  | 3                                      | 3                                       | -                   | 15                                   | ПК-1                    | ПК-1.2                 |
| 3     | ЯМР спектроскопия  | 3                                      | 3                                       | -                   | 15                                   | ПК-1                    | ПК-1.2                 |
| 4     | Масс-спектрометрия   | 3                                      | 3                                       | -                   | 15                                   | ПК-5                    | ПК-5.4                 |
| 5     | ЭПР и мессбауэровская спектроскопия                                | 3                                      | 3                                       | -                   | 15                                   | ПК-5                    | ПК-5.4                 |
| 6     | Хроматографический анализ органических соединений                  | 3                                      | 3                                       | -                   | 52                                   | ПК-5                    | ПК-5.4                 |
| 7     | Обработка и интерпретация спектральных и хроматографических данных | -                                      | -                                       | 80                  | -                                    | ПК-1,<br>ПК-5           | ПК-1.2<br>ПК-5.4       |

##### 4.2. Занятия лекционного типа.

| № раздела дисциплин | Наименование темы и краткое содержание занятия  | Объем, акад. часы | Инновационная форма        |
|---------------------|---|-------------------|----------------------------|
| 1                   | <p><b>Инфракрасная спектроскопия</b></p> <p>Принципы устройства и действия ИК спектрометра. Подготовка образцов различного типа для анализа. Теоретические основы ИК спектроскопии. Валентные и деформационные колебания. Область «отпечатков пальцев». Спектры комбинационного рассеивания и их взаимосвязь с ИК спектрами. Симметрия молекул. Анализ и интерпретация ИК спектров органических соединений. Характеристичные частоты колебаний основных функциональных групп.</p> | 3                 | лекция – пресс-конференция |

| №<br>раздела<br>дисциплин | Наименование темы<br>и краткое содержание занятия   | Объем,<br>акад.<br>часы | Инновационная<br>форма     |
|---------------------------|---|-------------------------|----------------------------|
| 2                         | <p style="text-align: center;"><b>Ультрафиолетовая и люминесцентная спектроскопия</b></p> <p>Техника и методики электронной спектроскопии. Подготовка образцов. Растворители для анализа. Концентрация растворов. Твердые образцы. Теоретические основы спектров поглощения и люминесценции. Хромофорные и ауксохромные группировки. Взаимосвязь спектров поглощения и люминесценции. Спектры возбуждения люминесценции. Закон Ламберта-Бугера-Бера. Правило зеркальной симметрии. Классификация электронных переходов. Правила отбора. Квантово-химические расчеты спектров поглощения. Расчет спектров поглощения по правилу аддитивности. Анализ и интерпретация спектров поглощения и люминесценции органических соединений. Характеристичные полосы основных хромофорных групп. Анализ и идентификация смесей веществ. Программы для обработки полученных спектров поглощения и люминесценции (Excel, Origin).</p> | 3                       | лекция – пресс-конференция |
| 3                         | <p style="text-align: center;"><b>Спектроскопия ядерного магнитного резонанса</b></p> <p>Устройство ЯМР спектрометра. Импульсная Фурье-спектроскопия. Приготовление образцов для анализа. Растворители и стандарты, используемые в технике ЯМР спектроскопии. Сдвигающие реагенты. Теоретические основы ЯМР спектроскопии на ядрах <math>^1\text{H}</math> и <math>^{13}\text{C}</math>. Основные параметры ЯМР спектра: химический сдвиг, константа спин-спинового взаимодействия и мультиплетность спектров, интегральная интенсивность сигналов. Квантово-химические расчеты ЯМР спектров. Примерные химические сдвиги сигналов ЯМР ядер <math>^1\text{H}</math> и <math>^{13}\text{C}</math> для основных функциональных групп. Анализ спектров ЯМР высокого разрешения. Основы двумерной ЯМР спектроскопии. Программы для обработки полученных спектров (Nuts32, WinNMR)</p>                                       | 3                       | лекция – пресс-конференция |

| № раздела дисциплин | Наименование темы и краткое содержание занятия  | Объем, акад. часы | Инновационная форма        |
|---------------------|---|-------------------|----------------------------|
| 4                   | <p align="center"><b>Масс-спектрометрия</b></p> <p>Принципиальные схемы масс-спектрометров. Требования к анализируемому образцу. Методы ионизации молекул. Молекулярные и осколочные ионы. Теоретические основы масс-спектрометрии органических соединений. Закономерности фрагментации органических и элементоорганических соединений. Масс-спектры основных классов органических соединений. Хроматомасс-спектрометрия. Лазерно-десорбционная масс-спектрометрия тонких пленок органических соединений</p>  | 3                 | лекция – пресс-конференция |
| 5                   | <p align="center"><b>ЭПР и мессбауэровская спектроскопия</b></p> <p>Принципы условия и действия спектрометров ЭПР. Теоретические основы спектроскопии ЭПР. Условия электронного парамагнитного резонанса. Объекты исследования спектроскопии ЭПР. g-Фактор. Анализ спектров ЭПР. Теоретические основы гамма-резонансной (мессбауэровской) спектроскопии. Условие гамма-резонанса. Объекты исследования в гамма-резонансной (мессбауэровской) спектроскопии. Принципиальная схема мессбауэровского спектрометра. Параметры мессбауэровских спектров. Применение мессбауэровской спектроскопии в исследовании хлорофилла и гемоглобина.</p> | 3                 | лекция – пресс-конференция |
| 6                   | <p align="center"><b>Хроматографический анализ органических соединений</b></p> <p>Основные типы хроматографического анализа органических соединений. Колоночная и планарная хроматография. Классификация по агрегатному состоянию фаз. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Основные характеристики разделения смеси веществ. Элюотропные ряды.</p>  | 3                 | лекция – пресс-конференция |



### 4.3. Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия).

#### 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                    | <p><b>Инфракрасная спектроскопия</b></p> <p>Анализ инфракрасных спектров соединений различных химических классов. Инфракрасные спектры карбоновых кислот и их производных (амидов, имидов, нитрилов). Инфракрасные спектры азотсодержащих соединений (нитро-, нитрозо-, азо-производные, амины). Инфракрасные спектры кислородсодержащих соединений (спирты, эфиры). Инфракрасные спектры сложных органических соединений на примере органических красителей (фталоцианиновые, полиметиновые, азокрасители). Идентификация неизвестных соединений и анализ смесей веществ. Обработка спектров.</p>   | 3                 | 2                                       | КрСт, Ф, МШ         |
| 2                    | <p><b>Ультрафиолетовая и люминесцентная спектроскопия</b></p> <p>Методики приготовления растворов для анализа. Спектры поглощения основных классов органических соединений. Спектры поглощения красителей. Зависимость положения максимума поглощения от введенного хромофора. Влияние кислотности среды на спектры поглощения. Анализ спектров поглощения смеси двух и более веществ. Основные органические люминофоры. Производные азометинов, нафталимидов, азотсодержащих гетероциклов. Бифлуорофоры. Макрогетероциклические люминофоры. Влияние среды на спектры люминесценции (рН, природа растворителя и т.д.). Программы для обработки полученных спектров поглощения и люминесценции (Excel, Origin). Построение графиков в программе Origin, определение максимумов поглощения и люминесценции. Математическая обработка данных.</p> | 3                 | 1                                       | КрСт, Ф, МШ         |

| №<br>раздела<br>дисциплины | Наименование темы<br>и краткое содержание занятия   | Объем,<br>акад. часы |   | Инновационная<br>форма |
|----------------------------|---|----------------------|---|------------------------|
|                            |   | всего                | в том<br>числе<br>на<br>практи-<br>ческую<br>подго-<br>товку* |                        |
| 3                          | <p><b>Спектроскопия ядерного магнитного резонанса</b></p> <p>Растворители для ЯМР спектроскопии. Внутренние и внешние стандарты. Шкалы химических сдвигов. Химические сдвиги протонов основных функциональных групп. Положение сигналов протонов гидрокси- и аминогрупп. Водородная связь. Область сигналов ароматических протонов. Вицинальные и геминальные протоны. Влияние электронных эффектов на положение сигналов. Интерпретация спектров, спектры первого порядка и сложные спиновые системы. Интегральные интенсивности сигналов. Расщепление сигналов вследствие взаимодействия протонов. Константы спин-спинового взаимодействия. Методы определения строения органических соединений по спектру ПМР. Анализ спектров ЯМР смеси веществ, определение количества примесей. Анализ спектров с помощью программ Nuts32, WinNMR. Подготовка спектров ЯМР для опубликования в печатных изданиях и презентациях. Двумерная спектроскопия. Расшифровка двумерных спектров ЯМР.</p> | 3                    | 1   | КрСт, Ф, МШ            |
| 4                          | <p><b>Масс-спектрометрия</b></p> <p>Практика анализа органических соединений методами масс-спектрометрии. Определение молекулярного иона. Фрагментация сложных ароматических и гетероароматических соединений. Интерпретация масс-спектров. Применение фотоионизации при исследовании состава тонких пленок органических полупроводников – металлофталоцианинов. Работа с базами данных и библиотеками масс-спектров для структурного анализа. Обработка масс-спектра для представления в графическом и табличном виде.</p>   | 3                    |   | КрСт, Ф, МШ            |

| №<br>раздела<br>дисциплины | Наименование темы<br>и краткое содержание занятия   | Объем,<br>акад. часы |   | Инновационная<br>форма |
|----------------------------|---|----------------------|---|------------------------|
|                            |   | всего                | в том<br>числе<br>на<br>практи-<br>ческую<br>подго-<br>товку* |                        |
| 5                          | <p><b>ЭПР и мессбауэровская спектроскопия</b></p> <p>Типичные спектры ЭПР. Свободные радикалы, ион-радикалы, молекулы в триплетных состояниях. Применение спектроскопии ЭПР в структурных и кинетических исследованиях органических соединений. Семихиноны. Комплексы переходных металлов. Характеристики ядер, используемых в мессбауэровской спектроскопии. Методы исследования строения комплексов железа, европия, олова с органическими лигандами, на примере макрогетероциклических соединений.</p> | 3                    |   | КрСт, Ф, МШ            |
| 6                          | <p><b>Хроматографический анализ органических соединений</b></p> <p>Практика хроматографического анализа. Идентификация соединений с помощью тонкослойной хроматографии. Разделение смеси веществ с помощью колоночной хроматографии. Применение высокоэффективной жидкостной хроматографии для идентификации органических соединений</p>  | 3                    |   |                        |

### 4.3.2. Лабораторные занятия.

| №<br>раздела<br>дисциплины | Наименование темы<br>и краткое содержание занятия  | Объем,<br>акад. часы |  | Примечания |
|----------------------------|--|----------------------|--|------------|
|                            |  | всего                | в том числе<br>на<br>практическую<br>подготовку* |            |
| 7                          | <p style="text-align: center;"><b>Обработка и интерпретация<br/>спектральных и хроматографических<br/>данных</b></p> <p>Темы лабораторных занятий непосредственно связаны с научно-исследовательской работой сотрудников кафедры химической технологии органических красителей и фототропных соединений.</p> <p>Темы лабораторных заданий: исследование спектральных и хроматографических характеристик оригинальных ароматических и гетероароматических веществ. Разработка методов идентификации промежуточных продуктов и аналитических реагентов для медицинской диагностики. Анализ спектральных характеристик органических красителей, фототропных соединений и биологически активных веществ. Инфракрасная спектроскопия органических красителей. Колоночная и тонкослойная препаративная распределительная хроматография. Расшифровка и визуализация спектральных данных. Сравнение полученных результатов с литературными данными (базами данных). Подготовка спектральных данных для публикации.</p> <p>Выполненные лабораторные задания могут быть использованы при выполнении курсового проекта и выпускной квалификационной работы.</p> | 80                   | 40   |            |

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

| №<br>Раздела<br>дисциплины | Перечень вопросов для<br>самостоятельного изучения  | Объем,<br>акад. часы | Форма<br>контроля |
|----------------------------|---|----------------------|-------------------|
| 1                          | <b>ИК спектроскопия.</b><br>Типы валентных и деформационных колебаний. Характеристические полосы колебаний основных функциональных групп. ИК спектры моно-, ди- и три-замещенных бензола. Обертоны. Дальняя и ближняя ИК спектроскопия. Расшифровка спектров органических соединений в рамках задания на курсовую работу.                                 | 15                   | Устный опрос      |
| 2                          | <b>УФ и люминесцентная спектроскопия.</b><br>Современная теория цветности. Типы электронных переходов. Электронно-возбужденные состояния. Процессы переноса энергии. Тушители люминесценции. Спектры поглощения основных хромофорных групп. Расчет спектров поглощения. Расшифровка спектров органических соединений в рамках задания на курсовую работу. | 15                   | Устный опрос      |
| 3                          | <b>ЯМР спектроскопия.</b><br>Природа спектров ЯМР. Спектроскопия ЯМР на ядрах $^{13}\text{C}$ . Двумерная спектроскопия. Расчет спектров ЯМР с помощью программного пакета ChemDraw. Расшифровка ЯМР спектров органических соединений в рамках заданий на курсовую работу.  | 15                   | Устный опрос      |
| 4                          | <b>Масс-спектрометрия.</b><br>Области применения метода масс-спектрометрии для идентификации органических соединений. Методы ионизации образцов. Определение состава и строения вещества по данным масс-спектрометрии. Знакомство с библиотеками данных. Элементный анализ.   | 15                   | Устный опрос      |
| 5                          | <b>ЭПР и мессбауэровская спектроскопия.</b><br>Основы спектроскопии электронного парамагнитного резонанса. g-Фактор. Области применения спектроскопии ЭПР. Основы $\gamma$ -резонансной спектроскопии. Изомерные сдвиги. Области применения мессбауэровской спектроскопии.  | 15                   | Устный опрос      |
| 6                          | <b>Хроматографический анализ.</b><br>Принципы ВЭЖХ. Сорбенты, подвижные фазы, способы детектирования, времена удерживания.  | 52                   | Устный опрос      |

#### **4.5. Примерные темы курсовых проектов**

1. Исследование инфракрасных спектров производных мочевины.
2. Исследование инфракрасных спектров фотохромных соединений.
3. Исследование инфракрасных спектров красителей с заданными свойствами.
4. Исследование инфракрасных спектров замещенных фталодинитрилов.
5. Исследование инфракрасных спектров полиметиновых красителей.
6. Исследование инфракрасных спектров макрогетероциклических соединений.
7. Исследование инфракрасных спектров промежуточных продуктов для лекарственных соединений.
8. Исследование инфракрасных спектров промежуточных продуктов и аналитических реагентов для медицинской диагностики.
9. Исследование инфракрасных спектров новых азокрасителей.
10. Исследование инфракрасных спектров мономеров для ЖК полимеров.
11. Исследование спектров поглощения и люминесценции новых органических люминофоров.
12. Исследование спектров поглощения и люминесценции фотохромных соединений.
13. Исследование спектров поглощения и люминесценции красителей с заданными свойствами.
14. Исследование спектров поглощения и люминесценции замещенных фталодинитрилов.
15. Исследование спектров поглощения и люминесценции полиметиновых красителей.
16. Исследование спектров поглощения и люминесценции макрогетероциклических соединений.
17. Исследование спектров поглощения и люминесценции аналитических реагентов для медицинской диагностики.
18. Исследование спектров поглощения и люминесценции новых азокрасителей.
19. Исследование спектров поглощения новых композиций пленочных светофильтров.
20. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров производных мочевины.
21. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров красителей с заданными свойствами.
22. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров замещенных фталодинитрилов.
23. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров полиметиновых красителей.
24. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров макрогетероциклических соединений.
25. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров новых органических люминофоров.
26. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров промежуточных продуктов для лекарственных соединений.
27. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров продуктов и аналитических реагентов для медицинской диагностики.
28. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров новых азокрасителей.
29. Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров мономеров для ЖК полимеров.

#### **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: <https://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 защиты курсового проекта и зачета.

Защита курсового проекта проходит публично в формате научного доклада и может являться «генеральной репетицией» перед проведением ИГА в формате защиты выпускной квалификационной работы магистра.

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачет предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций. При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

### ВАРИАНТ 1

- 1) Мультиплетность сигналов протонов в спектре ЯМР. Природа расщепления сигналов. Треугольник Паскаля. Практическое применение.
- 2) Характерные частоты валентных и деформационных ИК колебаний азотсодержащих групп.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «зачтено»<sup>5</sup>.

---

<sup>5</sup> Для промежуточной аттестации в форме зачёта – «зачёт».

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

### а) печатные издания:

1. Соколова, Н. Б. Элементный и функциональный анализ в органической химии: учебное пособие / Н. Б. Соколова ; Минобрнауки России, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений. - Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2014. – 31 с.

2. Зиминов, А. В. Применение ИК спектроскопии для исследования структурных особенностей органических соединений : учебное пособие / А. В. Зиминов, Н. Б. Соколова ; Минобрнауки России, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений. - Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2016. - 51 с.

3. Масленников, И. Г. Введение в практику использования метода ядерного магнитного резонанса : учебное пособие / И. Г. Масленников ; Минобрнауки России, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. - Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2013. - 33 с.

### б) электронные учебные издания<sup>6</sup>:

1 Мызников, Л. В. Основы фотохимии. Электронные спектры и строение органических соединений : Учебное пособие / Л. В. Мызников, С. В. Ворона ; Минобрнауки России, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической технологии органических красителей и фототропных соединений. - Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2021. - 96 с. : цв. ил. - // СПбГТИ. Электронная библиотека. – URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 23.03.2021). Режим доступа: для зарегистрир. пользователей

2 Спектральные методы анализа. Практическое руководство : Учебное пособие для вузов по спец. ВПО "Фундаментальная и прикладная химия" / В. И. Васильева, О. Ф. Стоянова, И. В. Шкутина [и др.] ; Под редакцией В. Ф. Селеменева и В. Н. Семенова. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2021. - 413 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-1638-7 : // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.04.2021). - Режим доступа: по подписке.

---

<sup>6</sup> В т.ч. и методические пособия



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

учебный план, РПД и учебно-методические материалы:

<http://media.technolog.edu.ru>

### *Электронно-библиотечные системы:*

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

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

### *Сайт фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ):*

<http://bibl.lti-gti.ru>

### *Специализированные системы и сайты для поиска научной информации по химии и химической технологии тонкого органического синтеза:*

<http://www.sciencedirect.com>

<http://www.scopus.com/home.url>

<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.do>

<http://www.webofknowledge.com/>

<http://elibrary.ru/defaultx.asp>

<http://www.springerlink.com/>

<http://www.rsc.org/>

<https://www.taylorfrancis.com/>

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/>

<http://www.chem.msu.ru/rus/library/welcome.html>

<http://onlinelibrary.wiley.com/?CRETRY=1&SRETRY=0>

<http://rushim.ru/books/books.htm>

<http://www.chemport.ru/index.php?cid=29>

<https://www.libnauka.ru/>

<https://yandex.ru/patents>

<https://scholar.google.ru/>

<http://www.physchembio.ru/>

<https://www.pesticidy.ru/>

<http://www.cnshb.ru/AKDiL/0034/default.shtm>

[https://www.rlsnet.ru/mnn\\_alf.htm](https://www.rlsnet.ru/mnn_alf.htm)

[https://go.drugbank.com/structures/search/small\\_molecule\\_drugs/structure](https://go.drugbank.com/structures/search/small_molecule_drugs/structure)

[http://www.chimfak.sfedu.ru/images/files/Organic\\_Chemistry/index.htm](http://www.chimfak.sfedu.ru/images/files/Organic_Chemistry/index.htm)

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/aromat/welcome.html#1>

<https://studfile.net/preview/2066190/>

<https://www.worldscientific.com/worldscinet/jpp>

<https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/intro1.htm>

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

Все виды занятий по дисциплине «Современные методы идентификации органических соединений» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТО:

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.

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 047-2008 Система стандартов безопасности труда. Организация обучения студентов безопасности труда при проведении учебных лабораторных работ.

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

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

СТО СПбГТИ (ТУ) 044-2012. Стандарт организации. Комплексная система управления качеством деятельности вуза. Виды учебных занятий. Курсовой проект. Курсовая работа. Общие требования.

СТП СПбГТИ (ТУ) 006-2009. Стандарт предприятия. Комплексная система управления качеством деятельности вуза. Подготовка и оформление авторских текстовых оригиналов для издания.

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 приходиться, имея знания 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;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

### **10.2. Программное обеспечение<sup>7</sup>.**

Microsoft Office (Microsoft Excel, Microsoft Word);

Стандартные программные продукты «Microsoft Office».

Компьютерная молекулярная графика: бесплатно распространяемые (no fee, free, trial versions) на соответствующих сайтах (см. ниже) пакеты программ «ACD/Labs» («ACD/ChemSketch»), «MDL/ISIS» / «Symyx» / «Accelrys» / «BIOVIA» / Dassault Systèmes («ISIS Draw» и более поздние версии этого продукта – «Symyx Draw», «Accelrys Draw», «BIOVIA Draw»), «ChemOffice» («ChemDraw») и т. п. – от разработчиков программных продуктов по химии.

Программы обработки экспериментальных данных: SpinWorks 3 (и более поздние версии) – свободно распространяемая программа обработки и визуализации ЯМР спектров органических соединений. MestReNova Lite - программа обработки и визуализации ЯМР спектров органических соединений.

---

<sup>7</sup> В разделе отображаются комплекты лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства, необходимого для обеспечения дисциплины

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

а) Информационно-справочные системы:

<http://www.elibrary.ru>;

<http://www.viniti.ru>;

<http://www.chemport.ru>;

<http://www.springerlink.com>;

<http://www.uspto.gov>;

<https://www.reaxys.com>

б) Современные профессиональные базы данных:

электронно-библиотечные системы, предлагаемые библиотекой СПбГТИ (ТУ):

ЭБС «Лань»;

электронная библиотека СПбГТИ (ТУ) (на базе ЭБС «Библиотех»);

справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»;

### 11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы<sup>8</sup>.

Для проведения занятий используется лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным проектором с проекционным экраном; компьютерный класс с подключенными к локальной сети СПбГТИ (ТУ) периферийными устройствами и выходом в Интернет через институтский сервер; компьютерное (*hardware*) и программное (*software*) обеспечение для выполнения практических работ; лабораторные помещения с приборами и оборудованием для выполнения НИР.

#### *Перечень учебных и лабораторных помещений и их оборудование*

| Адрес  | Наименование учебных кабинетов/лабораторий для проведения практических занятий | Оснащенность учебных кабинетов/лабораторий для проведения практических занятий   |
|--|--|--|
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, аудитория (помещение №6)                                      | Специализированная мебель (56 посадочных мест), доска меловая/маркерная, мультимедийный проектор с экраном, ноутбук  |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, компьютерный класс (помещение №5)                             | Специализированная мебель (компьютерные столы, 15 рабочих мест), персональные компьютеры, 15 шт., с кабельным подключением к сети Интернет   |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, учебная лаборатория (помещение № 29)                          | Специализированная мебель (лабораторные столы, вытяжные шкафы, 14 рабочих мест), насосы вакуумные мембранные, насосы вакуумные водоструйные, дистиллятор, шкафы сушильные (вакуумные), электронные весы, |

<sup>8</sup> В разделе отображается состав помещений, которые представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой по дисциплине, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения.

| Адрес  | Наименование учебных кабинетов/лабораторий для проведения практических занятий                                 | Оснащенность учебных кабинетов/лабораторий для проведения практических занятий   |
|--|--|--|
|  |  | мешалки магнитные, устройства перемешивающие электромеханические, лабораторная химическая посуда, термометры, установка для перегонки с водяным паром, электрообогревающие устройства, оборудование для тонкослойной хроматографии, хроматоскоп, рН-метр |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, лаборатория синтеза гетероциклических соединений (помещение №2)                               | Микроволновый реактор, ротационный испаритель  |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, лаборатория спектральных методов исследований (помещения №№3, 4)                              | УФ-Вид спектрофотометры, ИК спектрофотометр  |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, помещение для самостоятельной работы студентов (помещение №1)                                 | Специализированная мебель (12 посадочных мест), доска меловая, демонстрационный экран  |
| 190013, г. Санкт-Петербург, Московский проспект, д. 24-26/49, лит. Б | Кафедра ХТОКиФС, помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования (помещение №20) | Специализированная мебель, оборудование для профилактического обслуживания учебного оборудования   |

**Перечень компьютерной техники и сетевого оборудования**

| Наименование и марка оборудования   | Назначение и краткая характеристика оборудования   | Год ввода в эксплуатацию |
|---|--|--------------------------|
| Проектор Acer X113PH_800×600  | Презентация иллюстративных материалов  | 2016                     |
| Компьютерный класс кафедры, компьютеры PC, 15 шт.   | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2017                     |
| Ноутбук MSI GP72 6QF-273RU Ci7-6700HQ 2.6/17.3"FHD/GTX960/W10/8 G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_Blac | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п. | 2016                     |

| Наименование и марка оборудования   | Назначение и краткая характеристика оборудования   | Год ввода в эксплуатацию |
|---|--|--------------------------|
| Ноутбук Asus X756UV Ci3-6100U<br>2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_ | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.                             | 2016                     |
| Ноутбук Asus X756UV Ci3-6100U<br>2.3/17.3"/GT920MX/W10/4G/1000/DVDRW/WF/BT/Cam_brown_ | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.                             | 2016                     |
| Ноутбук Asus X751MA PQC N3530   | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.                             | 2014                     |
| Ноутбук Asus X751MA PQC N3530   | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.                             | 2014                     |
| Компьютер KEY HM Pro H-505-4G1000_Ci5-4570  | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.                             | 2014                     |
| Компьютер KEY HM Pro H-505-4G1000_Ci5-4570  | Работа в Интернете, профессиональные вычисления, профессиональные (химические) приложения, подготовка текстов, презентаций и т. п.                             | 2014                     |
| Общеинститутские серверы  | Кабельное сетевое соединение. Широкополосное проводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Кабельная технология Ethernet, скорость 100 Мбит в сек. |                          |
| Общеинститутские серверы  | Беспроводное сетевое соединение. Беспроводное подключение к локальной сети, выход в Интернет. Беспроводная технология WiFi, скорость 50 Мбит в сек.            |                          |

### Перечень лабораторного оборудования

| Наименование и марка оборудования                    | Назначение и краткая характеристика оборудования  |
|--|---|
| Спектрофотометр СФ-26                                | Измерение коэффициента пропускания (оптической плотности) жидких и твердых веществ в области от 186 нм до 1100 нм |
| Спектрофотометр СФ-46                                | Измерение коэффициента пропускания (оптической плотности) жидких и твердых веществ в области от 186 нм до 1100 нм |
| Спектрофотометр СФ-2000                              | Измерение спектров поглощения, 200-900 нм   |
| ИК спектрофотометр ФСМ 2202                          | Измерение колебательных (инфракрасных) спектров поглощения растворов и твердых образцов                           |
| рН-метр 410  | Определение рН жидких сред  |
| Насос вакуумный мембранный ME LCNT                   | Вакуумирование для фильтрации жидкостей   |
| Ротационный испаритель RV-06-ML                      | Концентрирование растворов при пониженном давлении  |
| Дистиллятор ДЭ-10                                    | Получение дистиллированной воды   |
| Шкаф сушильный СНОЛ 67/350                           | Сушка веществ при заданной температуре  |
| Шкаф сушильный вакуумный. SPT 200                    | Сушка веществ при заданной температуре  |
| Электронные весы: ВЛ-210, ВЛТЭ-500, Е-410, ЕТ-600П-Е | Взвешивание   |
| Мешалка магнитная ПЭ-6110                            | Проведение синтеза с небольшим количеством веществ  |
| Хроматограф ЛХМ-8МД                                  | Хроматографический анализ   |
| Вакуумный пост                                       | Получение глубокого вакуума   |

Помещения кафедры соответствуют действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных и научно-исследовательских работ.

Обучающийся может пользоваться приборами и оборудованием Инжинирингового центра СПбГИ (ТУ) в установленном порядке ([Инжиниринговый центр \(technolog.edu.ru\)](http://Инжиниринговый_центр(technolog.edu.ru))).

#### **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 СПбГИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине  
«Современные методы идентификации органических соединений»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

| Компетенции |  |                                 |
|-------------|--|---------------------------------|
| Индекс      | Формулировка <sup>9</sup>  | Этап формирования <sup>10</sup> |
| ПК-1        | Проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок при исследовании методов синтеза и свойств продуктов тонкого органического синтеза, органических красителей и фототропных соединений и синтетических БАВ | промежуточный                   |
| ПК-5        | Организация аналитического контроля этапов разработки продуктов тонкого органического синтеза с заданными свойствами   | промежуточный                   |

<sup>9</sup> **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты не выделяются).

<sup>10</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)  |
| ПК-1.2<br>Определение сферы применения результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ по созданию материалов на основе органических красителей и синтетических БАВ | Знать: существующие методы идентификации органических соединений, их особенности и области использования (ЗН-1); | Правильные ответы на вопросы № 1-20 зачета, выполнение курсового проекта | Знает, но отвечает с ошибками об основных спектральных методах идентификации органических красителей и синтетических БАВ                                       | Знает основные спектральные методы идентификации органических красителей и синтетических БАВ, но отвечает с наводящими вопросами. | Правильно, без ошибок, рассказывает об основных спектральных методах идентификации органических красителей и синтетических БАВ, уверенно отвечает на дополнительные вопросы.           |
|   | Уметь: расшифровывать спектры органических соединений (У-1);   | Правильные ответы на вопросы № 1-20 зачета, выполнение курсового проекта | Имеет поверхностное представление о спектральных характеристиках органических красителей и синтетических БАВ, допускает грубые ошибки при расшифровке спектров | Умеет проводить анализ и расшифровывать спектры (ИК, УФ, ЯМР) органических красителей, но допускает незначительные ошибки.        | Самостоятельно и взвешенно проводит анализ и расшифровывает спектры (ИК, УФ, ЯМР) органических красителей и гетероциклических соединений, уверенно отвечает на дополнительные вопросы. |
|   | Владеть: навыками обработки полученной спектральной информации (Н-1).  | Правильные ответы на вопросы № 1-20 зачета, выполнение курсового проекта | Имеет слабые знания о методах обработки спектральных данных и основных программах для обработки информации.  | Имеет знания о методах и основных программах обработки спектральных данных, при ответе допускает 1-2 ошибки.                      | Демонстрирует уверенные знания о методах и основных программах обработки спектральных данных, уверенно отвечает на дополнительные вопросы.   |



| Код и наименование индикатора достижения компетенции   | Показатели сформированности (дескрипторы)   | Критерий оценивания   | Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)  |  |   |
|--|---|---|---|--|---|
|  |   |   | «удовлетворительно» (пороговый)   | «хорошо» (средний)   | «отлично» (высокий)   |
| ПК-5.4<br>Организация внедрения разработанных технических решений производства продуктов тонкого органического синтеза | Знать:<br>теоретические основы спектральных и хроматографических методов идентификации органических соединений (ЗН-1);                                  | Правильные ответы на вопросы № 21-39 зачета, выполнение курсового проекта | Знает, но отвечает с ошибками об основных хроматографических методах анализа органических красителей и синтетических БАВ. | Знает основы спектральных (ЭПР, Мессбауэровская спектроскопия) и хроматографических методов анализа, но отвечает с наводящими вопросами.                 | Правильно, без ошибок, рассказывает об основных методах спектральных (ЭПР, Мессбауэровская спектроскопия) и хроматографических методов анализа, отвечает на дополнительные вопросы. |
|  | Уметь:<br>пользоваться справочными данными и базами данных, включая базы данных в сети Интернет, для анализа и интерпретации спектральных данных (У-1); | Правильные ответы на вопросы № 21-39 зачета, выполнение курсового проекта | Имеет поверхностное представление об источниках информации и базах данных по спектральным данным                          | Умеет выбирать основные источники информации и базы данных, но при этом допускает незначительные ошибки в методологии поиска и интерпретации информации. | Самостоятельно выбирает современные базы данных и грамотно интерпретирует спектральные данные.  |
|  | Владеть:<br>навыками обработки и визуализации спектральных данных для представления их в отчетах, научных презентациях и публикациях (Н-1).             | Правильные ответы на вопросы № 21-39 зачета, выполнение курсового проекта | Имеет слабые навыки обработки и визуализации спектральных данных.   | Имеет навыки обработки и визуализации спектральных данных, подготовки печатных материалов, допуская 1-2 ошибки.  | Демонстрирует уверенные навыки обработки, визуализации и публикации спектральных данных без ошибок.   |

### **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. Основные положения современной теории цветности
2. Количественный анализ органических соединений методами УФ спектроскопии.
3. Техника и методы УФ и люминесцентной спектроскопии.
4. Электронные переходы: типы переходов, разрешенные и запрещенные переходы, электронно-возбужденные состояния.
5. Спектры люминесценции, основные параметры, флуоресценция и фосфоресценция.
6. Спектры поглощения органических красителей. Хромофоры и ауксохромы. Влияние строения соединения на его максимум поглощения.
7. Методы смещения максимума поглощения окрашенных веществ. Оптические отбеливатели и ИК красители.
8. Принципы ИК спектроскопии. Техника эксперимента. Взаимосвязь ИК и КР спектроскопии.
9. Качественный анализ ИК спектров органических соединений. Характеристические частоты.
10. Интерпретация ИК спектров. Область «отпечатков пальцев».
11. Валентные и деформационные колебания основных функциональных групп.
12. Основные параметры спектров ЯМР  $^1\text{H}$ .
13. Константы спин-спинового взаимодействия. Мультиплетность сигналов в спектре ЯМР  $^1\text{H}$ .
14. Химический сдвиг. Положение сигналов основных функциональных групп в спектре ЯМР  $^1\text{H}$ .
15. Использование интегральной интенсивности сигналов в спектре ЯМР  $^1\text{H}$ . Качественный и количественный анализ.
16. Воздействие на положение химических сдвигов протонов органического соединения.
17. Техника и методы ЯМР спектроскопии.
18. Растворители, стандарты в технике ЯМР спектроскопии.
19. Анализ ЯМР  $^1\text{H}$  спектра органического соединения, содержащего примеси.
20. Основы спектроскопии ЯМР на ядрах  $^{13}\text{C}$ .

#### **3.2 Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-5**

21. Теоретические основы масс-спектрометрии.
22. Методы ионизации органического соединения в масс-спектрометрии.
23. Примеры фрагментации органических соединений.
24. Основные параметры спектров ЭПР.
25. Основные параметры мессбауэровской спектроскопии. Объекты исследования.
26. Основные типы хроматографического анализа смеси органических веществ.
27. Применение ВЭЖХ для количественного анализа.
28. Планарная и колоночная хроматография для анализа и разделения органических соединений.
29. Особенности ионизации вещества в масс-спектрометрии.

30. Базы данных масс-спектров.
31. Исследование состава тонких пленок органических веществ методами масс-спектрометрии.
32. Совместное использование методов масс-спектрометрии с другими методами идентификации органических соединений.
33. Возможности спектроскопии ЭПР. Объекты исследования (свободные радикалы, триплетные молекулы).
34. Понятие изомерного сдвига в мессбауэровской спектроскопии.
35. Классификация методов хроматографического анализа.
36. Техника планарной и колоночной хроматографии.
37. Основы элементного анализа.
38. Основные программы для обработки и визуализации спектральных данных (УФ, ИК, ЯМР).
39. Современные базы данных по спектральным методам анализа.

### **3.3 Приблизительные темы курсовых проектов**

- 1) Исследование инфракрасных спектров производных мочевины.
- 2) Исследование инфракрасных спектров фотохромных соединений.
- 3) Исследование инфракрасных спектров красителей с заданными свойствами.
- 4) Исследование инфракрасных спектров замещенных фталодинитрилов.
- 5) Исследование инфракрасных спектров полиметиновых красителей.
- 6) Исследование инфракрасных спектров макрогетероциклических соединений.
- 7) Исследование инфракрасных спектров промежуточных продуктов для лекарственных соединений.
- 8) Исследование инфракрасных спектров промежуточных продуктов и аналитических реагентов для медицинской диагностики.
- 9) Исследование инфракрасных спектров новых азокрасителей.
- 10) Исследование инфракрасных спектров мономеров для ЖК полимеров.
- 11) Исследование спектров поглощения и люминесценции новых органических люминофоров.
- 12) Исследование спектров поглощения и люминесценции фотохромных соединений.
- 13) Исследование спектров поглощения и люминесценции красителей с заданными свойствами.
- 14) Исследование спектров поглощения и люминесценции замещенных фталодинитрилов.
- 15) Исследование спектров поглощения и люминесценции полиметиновых красителей.
- 16) Исследование спектров поглощения и люминесценции макрогетероциклических соединений.
- 17) Исследование спектров поглощения и люминесценции аналитических реагентов для медицинской диагностики.
- 18) Исследование спектров поглощения и люминесценции новых азокрасителей.
- 19) Исследование спектров поглощения новых композиций пленочных светофильтров.
- 20) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров производных мочевины.

- 21) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров красителей с заданными свойствами.
- 22) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров замещенных фталодинитрилов.
- 23) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров полиметиновых красителей.
- 24) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров макрогетероциклических соединений.
- 25) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров новых органических люминофоров.
- 26) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров промежуточных продуктов для лекарственных соединений.
- 27) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров продуктов и аналитических реагентов для медицинской диагностики.
- 28) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров новых азокрасителей.
- 29) Исследование ЯМР  $^1\text{H}$  спектров мономеров для ЖК полимеров.

**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 СПбГТИ:

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

СТО СПбГТИ (ТУ) 044-2012. Стандарт организации. Комплексная система управления качеством деятельности вуза. Виды учебных занятий. Курсовой проект. Курсовая работа. Общие требования.