

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 13.07.2021 13:33:38  
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  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2017 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**  
**ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ**  
(Начало обучения - 2017)

Специальность  
**18.05.01– Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий**

Специализация  
**№1 Химия и технология органических соединений азота**

Квалификация выпускника  
**инженер**

Форма обучения  
**очная**

Факультет **инженерно-технологический**  
Кафедра **химии и технологии органических соединений азота**

**Б1.Б.31.06**

Санкт-Петербург  
2017

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчик		д.х.н., профессор, Р.Е. Трифионов

Рабочая программа дисциплины «**Современные методы исследования веществ и материалов**» обсуждена на заседании кафедры химии и технологии органических соединений азота,

03 февраля 2017, протокол № 16.

Заведующий кафедрой ХТОСА

Кирюшкин А.А.

Одобрено учебно-методической комиссией инженерно-технологического факультета  
15 марта 2017 г, протокол №...7...

Председатель комиссии

Прояев В.В.

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель направления 18.05.01 - химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий д.х.н., профессор		В.В. Самонин
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	04
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	06
3. Объем дисциплины .....	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	07
4.2. Занятия лекционного типа.....	08
4.3. Занятия семинарского типа.....	09
4.3.1. Семинарские занятия	09
4.3.2. Лабораторные занятия	10
4.4. Самостоятельная работа.....	11
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 .....	13
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	14
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	14
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	15
10.2. Программное обеспечение.....	16
10.3. 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 специалитета обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОК-1	Способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	<p><b>Знать:</b> Алгоритмы нитрования соединений, нитрующие агенты используемые при нитровании, а также методы их получения, механизмы нитрования органических соединений. Базовые понятия и термины процессов нитрования. Методы анализа нитросоединений и условия из реализации. Способы подготовки веществ и материалов к аналитической работе. Приёмы и методы аналитической работы для использования в процессах получения нитросоединений.</p> <p><b>Уметь:</b> Использовать механизмы реакций нитрования соединений для разработки процессов получения промышленно важных веществ. Использовать методы получения нитросоединений. Использовать физико-химические методы анализа полученных нитросоединений.</p> <p><b>Владеть:</b> Методами нитрования органических соединений. Методами анализа нитросоединений. Навыками выполнения теоретических и экспериментальных исследований с использованием аналитического оборудования. Навыками выполнения теоретических и экспериментальных исследований.</p>
ОПК-2	Способностью профессионально использовать современное технологическое и аналитическое оборудование, способностью к проведению научного исследования и анализу полученных при его проведении результатов	<p><b>Знать:</b> Принципы органического синтеза; химические и физико-химические методы анализа веществ; основы методологии органического синтеза и анализа химических веществ; физические основы современных методов инструментального анализа.</p> <p><b>Уметь:</b> работать с научной, патентной и нормативной документацией; выбирать основное и вспомогательное технологическое оборудование по каталогам библиотеки СПбГТИ(ТУ) и в интернете; обрабатывать данные, полученные при синтезе органических соединений; обрабатывать полученные данные при работе на современном аналитическом оборудовании.</p> <p><b>Владеть:</b> Техникой проведения эксперимента в соответствии с выбранной методикой; приёмами и методами органического синтеза; химическими и физико-</p>

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
		химическими методами анализа химических веществ.
ПК-11	Способностью применять современные методы исследования, проводить стандартные и сертификационные испытания материалов, изделий и технологических процессов	<p><b>Знать:</b> Современные методы исследования и проведения стандартизационных и сертификационных испытаний материалов, изделий и технологических процессов.</p> <p><b>Уметь:</b> Использовать современные методы исследования, проведения сертификационных испытаний материалов, изделий и технологических процессов, методов их стандартизации.</p> <p><b>Владеть:</b> Методами проведения сертификации и стандартизации современных материалов, изделий и технологических процессов; приёмами использования современных методов исследования при проведении сертификационных испытаний материалов, изделий и технологических процессов.</p>
ПК-12	Способностью планировать и проводить необходимый эксперимент, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	<p><b>Знать:</b> Химические и физико-химические методы анализа исходных промежуточных и конечных веществ, алгоритм обработки экспериментальных данных; алгоритмы и методологию эксперимента; способы и механизмы интерпретации полученных экспериментальных результатов.</p> <p><b>Уметь:</b> Планировать химический эксперимент в соответствии с поставленными задачами и прогнозировать его возможные аналитические результаты; интерпретировать полученные в ходе работы результаты; оценивать уровень эффективности использованных экспериментальных методов.</p> <p><b>Владеть:</b> Приёмами составления планов технологических или научно-исследовательских работ, нацеленных на получение определённого результата; навыками обработки и анализа результатов эксперимента, полученных при их проведении.</p>
ПСК-1.2	Способностью разрабатывать методики и программы проведения исследований индивидуальных и смесевых высокоэнергетических композиций. Их испытаний и контроля параметров	<p><b>Знать:</b> Свойства всех взаимодействующих веществ; существующие методы получения целевых продуктов; приборы для контроля параметров технологического или лабораторного научно-исследовательского процесса.</p> <p><b>Уметь:</b> Разрабатывать методики и программы проведения исследований индивидуальных и смесевых высокоэнергетических композиций; проводить операции контроля параметров технологического</p>

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
	технологического процесса их получения	процесса. <b>Владеть:</b> Методиками проведения исследований различных индивидуальных и смесевых высокоэнергетических композиций, проводить испытания и контроль технологического процесса получения целевых продуктов.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам специализации базовой части дисциплин и читается на 4 курсе в 7 семестре. Общая трудоёмкость 7 з.е.

Материал данной учебной дисциплины опирается на знание следующих дисциплин: аналитическая химия и физико-химические методы анализа; органическая химия; физическая химия.

Теоретическая часть дисциплины излагается в лекционном курсе. Полученные знания закрепляются на практических и лабораторных занятиях. Самостоятельная работа предусматривает работу с учебно-методическим и информационным обеспечением дисциплины, выполнение домашних заданий, тестирование по разделам «УФ/ВИД-спектроскопия», «ИК-спектроскопия», «Масс-спектрометрия» и «Хроматография». Предусматривается возможность написания рефератов по отдельным разделам дисциплины. В процессе изложения дисциплины проводятся демонстрационные и интерактивные занятия с использованием современного аналитического оборудования.

Промежуточная аттестация осуществляется в форме зачета и экзамена.

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего академических часов Очная форма обучения
<b>Общая трудоёмкость дисциплины</b> (зачётных единиц/академических часов)	252 (7 зач. ед)
<b>Контактная работа с преподавателем</b> .....	114
в том числе	
занятия лекционного типа.....	36
занятия семинарского типа	72
Семинары, практические занятия.....	36
Лабораторные работы	36
Курсовое проектирование	
КСР	6
Другие виды контактной работы	
<b>Самостоятельная работа</b> .....	84
<b>Форма текущего контроля</b>	
<b>Форма промежуточной аттестации</b>	зачёт, экзамен (54)

#### 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
			Семинарские занятия	Лабораторные работы	КСР		
1.	Значение физико-химических методов анализа в современном мире и их классификация	4	4	-	-	10	ОК-1
2.	УФ -спектроскопия: физические основы метода, расшифровка спектров, устройство и принципы действия спектрометров	4	4	8	2	12	ПК-10
3.	ИК-спектроскопия: физические основы метода, расшифровка спектров, устройство и принципы действия спектрометров	6	4	8	2	12	ПК-12
4.	Спектроскопия ЯМР: физические основы метода, расшифровка спектров, устройство и принципы действия спектрометров	6	6	8	2	12	ПСК-1.2
5.	Хроматография: физические основы метода, расшифровка и обработка хроматограмм, устройство и принципы действия газовых и жидкостных хроматографов	6	6	8	-	14	ПК-10
6.	Основы масс-спектрометрии: принципы и типы масс-спектрометров	6	6	4	-	12	ПК-12
7.	Разновидности масс-спектрометрии	4	6	-	-	12	ПСК-1.2
	Итого:	36	36	36	6	84	

#### 4.2. Занятия лекционного типа (36 ч.)

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Значение физико-химических методов анализа в современном мире и их классификация.</u> Общая характеристика инструментальных методов анализа (чувствительность, точность, достоинства, недостатки). Классификация ФХМА. Понятие аналитического сигнала.	4	Слайд-презентация
2	<u>УФ- спектроскопия: физические основы метода, расшифровка спектров, устройство и принципы действия спектрометров.</u> Принцип метода. Классификация спектроскопических методов анализа. Молекулярная абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области спектра. Цвет и спектр. Закон светопоглощения Бугера-Ламберта-Бера. Оптическая плотность, светопропускание, связь между ними.	4	Слайд-презентация
3	<u>ИК-спектроскопия: физические основы метода, расшифровка спектров, устройство и принципы действия спектрометров.</u> Методы исследования молекулярных колебаний. Инфракрасная спектрометрия и метод комбинационного рассеяния.	6	Слайд-презентация
4	<u>Спектроскопия ЯМР: физические основы метода, расшифровка спектров, устройство и принципы действия спектрометров.</u> Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии.	6	Слайд-презентация
5	<u>Хроматография: физические основы метода, расшифровка и обработка хроматограмм, устройство и принципы действия газовых и жидкостных хроматографов.</u> Принципы хроматографического разделения веществ. Классификация хроматографических методов анализа по агрегатному состоянию фаз, по механизму разделения, по аппаратурному оформлению, по способу проведения процесса. Хроматографический пик и его параметры.	6	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
6	<u>Основы масс-спектрометрии: принципы работы и типы масс-спектрометров.</u> 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.	<b>6</b>	Слайд-презентация
7	<u>Разновидности масс-спектрометрии.</u> Энергетическое состояние ионов, образующихся при ионизации. Принцип Франка-Кондона, адиабатический потенциал ионизации. Основное и электронно-возбужденные состояния молекулярного иона. Процессы перегруппировки в масс-спектрометрии.	<b>4</b>	Слайд-презентация
	Итого:	<b>36</b>	

#### 4.3. Семинарские занятия (36 ч.)

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Значение физико-химических методов анализа в современном мире и их классификация.</u> Общая характеристика инструментальных методов анализа (чувствительность, точность,	4	
2	<u>УФ- спектроскопии.</u> Проведение качественного и количественного анализа лекарственных веществ в соответствии с Фармакопейными статьями методом Вычисление погрешностей анализа. Расчет результатов анализа. Точность гравиметрических определений абсолютная и относительная ошибка. Определение содержания элемента в химическом веществе.	4	Дискуссия
3	<u>Идентификация структуры вещества методом ИК-спектроскопии:</u> подходы к расшифровке спектров. Установление структуры лекарственного вещества методом Фурье-ИК-спектроскопии.	6	

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
4	<u>Идентификация структуры вещества методом ЯМР-спектроскопии</u> : подходы к расшифровке спектров. Идентификация структуры органического соединения азота методов ПМР-спектроскопии.	<b>6</b>	Коллоквиум
5	Провести анализ качественного и количественного состава примесей субстанции эритромицина А методом ТСХ.	<b>6</b>	
6	<u>Основы масс-спектрометрии: принципы работы и типы масс-спектрометров</u> . 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.	<b>6</b>	
7	<u>Разновидности масс-спектрометрии</u> . Энергетическое состояние ионов, образующихся при ионизации. Принцип Франка-Кондона, адиабатический потенциал ионизации. Основное и электронно-возбужденные состояния молекулярного иона. Процессы перегруппировки в масс-спектрометрии.	<b>4</b>	Дискуссия
	Итого:	<b>36</b>	

#### 4.3. Лабораторные занятия (36 ч.)

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
2	<u>УФ- спектроскопии</u> . Проведение качественного и количественного анализа лекарственных веществ в соответствии с Фармакопейными статьями методом Вычисление погрешностей анализа. Расчет результатов анализа. Точность гравиметрических определений абсолютная и относительная ошибка. Определение содержания элемента в химическом веществе.	<b>8</b>	

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
3	<u>Идентификация структуры вещества методом ИК-спектроскопии</u> : подходы к расшифровке спектров. Установление структуры лекарственного вещества методом Фурье-ИК-спектроскопии.	<b>8</b>	
4	<u>Идентификация структуры вещества методом ЯМР-спектроскопии</u> : подходы к расшифровке спектров. Идентификация структуры органического соединения азота методов ПМР-спектроскопии.	<b>8</b>	
5	Провести анализ качественного и количественного состава примесей субстанции эритромицина А методом ТСХ.	<b>8</b>	
6	<u>Основы масс-спектрометрии: принципы работы и типы масс-спектрометров</u> . Образование и вид масс-спектра. Молекулярные ионы, многозарядные и метастабильные ионы. Элементный состав ионов.	<b>4</b>	
	Итого:	<b>36</b>	

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся (84 ч.).

№	Тема самостоятельной работы	Кол-во часов	
1	Виды аналитических сигналов, характеристики аналитических сигналов. Классификация спектроскопических методов. Методы количественного анализа в видимой области: метод градуировочного графика, метод добавок, метод сравнения со стандартом, метод молекулярного свойства, метод дифференциальной фотометрии. Аппаратура для абсорбционной спектроскопии. Основы квантовой теории и электронное строение органических соединений азота. Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали (МО). Гибридизация орбиталей. Делокализованные связи. Молекулярные электронные энергетические уровни. Принципы расчетов по методу молекулярных орбиталей Хюккеля.	<b>10</b>	
2	Молярный коэффициент поглощения света. Методы абсорбционного анализа: колориметрия, фотоколориметрия. Количественный фотометрический анализ. Условия фотометрического определения. Определение концентрации анализируемого раствора методом калибровочного графика. Применение метода в современных клинических и медико-биологических исследованиях. Порядок связей, индексы свободной валентности, распределение зарядов в молекулах с	<b>12</b>	<b>Устный и опрос</b>

	гетероатомами. Теория возмущений МО. Метод граничных орбиталей. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций. Концепция ароматичности. Правило Хюккеля. Ароматичность азотистых гетероциклов. Мезоионные соединения.		
3	Влияние прочности связи и массы колеблющихся атомов на частоту поглощения (волновое число). КР-спектр – мгновенный снимок молекулы. Излучатели, монохроматоры, типы кювет. Относительная интенсивность стоксовой и антистоксовой полос в спектрах КР. Преимущества и недостатки, области оптимального использования методов. Механическая модель молекулы. Конформации и конформационные равновесия. Энергии конформеров и их связь с реакционной способностью. Потенциалы внутреннего вращения и торсионные энергии органических соединений азота. Конформации насыщенных и ароматических азотистых гетероциклов. Инверсия гетероциклов и атомов азота; хиральность органических соединений азота. Конформации ароматических нитросоединений. Влияние эффектов сопряжения, внутри- и межмолекулярных водородных связей на конформацию.	12	Устный опрос
4	Протонный магнитный резонанс. Метод двойного резонанса. Применение спектров МР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Сравнение метода ЯМР с другими методами, его достоинства и ограничения. Конформации насыщенных и ароматических азотистых гетероциклов. Инверсия гетероциклов и атомов азота; хиральность органических соединений азота. Конформации ароматических нитросоединений. Влияние эффектов сопряжения, внутри- и межмолекулярных водородных связей на конформацию.	12	Устный опрос
5	Характеристики (абсолютные и относительные) и индексы удерживания, качественный анализ по хроматограмме. Методы количественного анализа (метод нормировки – простой и с калибровочными коэффициентами, метод внешнего и внутреннего стандарта). Селективность сорбента, критерии селективности. Эффективность хроматографического процесса. Понятие ВЭТТ. Теория теоретических тарелок, кинетическая теория. Газовая хроматография: классификация методов. Принципиальная схема хроматографа. Неподвижные фазы, подвижные фазы, требования к ним. Детекторы, их классификация. Методы жидкостной хроматографии. Особенности хроматографического процесса и аппаратуры. Области применения хроматографических методов разделения и определения. Стереoeлектронные и стерические эффекты в реакциях органических соединений азота. Стереоселективность и стереоспецифичность органических реакций.	14	Устный опрос
6	Методы ионизации: электронная ионизация, фотоионизация,	12	Устный

	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.и. Принципы асимметрического синтеза. Основные типы фрагментных процессов при ионизации электронами. Простые разрывы связей: отрывы алкильных радикалов, аллильный разрыв, бензильный разрыв, отрывы гетероатомов, образование ониевого ионов, образование ацильных ионов. Перегруппировочные процессы. Перегруппировки с миграцией атома водорода.		<b>й опрос</b>
7	Тандемная масс-спектрометрия. Основные понятия тандемной масс-спектрометрии. Методы активации ионов: активация соударением, активация с переносом или передачей заряда. Тандемная масс-спектрометрия во времени и тандемная масс-спектрометрия в пространстве. Основные задачи тандемной масс-спектрометрии. Мембранный ввод в источник ионов: принципы функционирования, преимущества и недостатки. Сочетание газовой хроматографии и масс-спектрометрии: особенности устройства и функционирования газовых хроматографов в системах ГХ/МС. Сочетание высокоэффективной жидкостной хроматографии и масс-спектрометрии: особенности устройства и функционирования жидкостных хроматографов в системах ВЭЖХ/МС.	<b>12</b>	<b>Устный й опрос</b>
	Итого:	<b>84</b>	

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

При чтении лекций используются материалы, представляемые в виде презентаций, с применением ресурса PowerPoint, включая анимационные режимы. Демонстрация - с помощью мультимедийного проектора, а также белой доски. В процессе обучения используются информационные материалы ведущих мировых производителей оборудования для производств малотоннажных химических продуктов.

В качестве учебных пособий для демонстрации условий применения аналитических методов на производстве может быть использован кафедральный стенд, моделирующий стадию нитрования ароматических субстратов серно-азотной нитрующей смесью, а также различные типы емкостных реакторов, моделей перемешивающих устройств, средства автоматического контроля. Используется оборудование ЦКП «Передовые методы

диагностики в химии». Для демонстрации работы микрореактора используются ресурсы кафедры оптимизации химических и биотехнологических производств СПбГТИ(ТУ).

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

Современное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить пороговый уровень освоения предусмотренных элементов компетенций. Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета. К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачёт предусматривает проверку освоения предусмотренных элементов компетенций, и комплектуется двумя вопросами (заданиями) для проверки знаний, умений и навыков. При сдаче зачёта, студент получает билет, состоящий из 1-го вопроса (задания) из перечня вопросов по дисциплине, время подготовки студента к устному ответу – до 30 минут.

Оценка «зачтено» (пороговый уровень) ставится студенту, обнаружившему понимание учебного материала в объеме, необходимом для предстоящей работы по профессии, справляющемуся с выполнением заданий, предусмотренных программой практики, при наличии в содержании отчета и его оформлении небольших недочётов или недостатков, затруднениях при ответах на вопросы.

Вторая промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена. К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Обобщённая оценка по итогам экзамена определяется с учётом характера и содержания ответов:

Оценка «отлично» ставится, если содержание ответов на вопросы свидетельствует об уверенных знаниях студента и о его умении качественно решать профессиональные задачи, соответствующие данному этапу подготовки.

Оценка «хорошо» ставится, если содержание ответов свидетельствует о достаточных знаниях студента и о его умении решать профессиональные задачи, но при наличии в содержании отчета и его оформлении небольших недочётов или недостатков.

Оценки «удовлетворительно» заслуживает студент, справляющийся с выполнением заданий, предусмотренных программой обучения, при наличии в ответах недочётов или недостатков, затруднениях при ответах на вопросы.

Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студенту при наличии в ответах существенных недочётов или недостатков, отсутствии ответов на вопросы, неконкретного характера выводов и предположений.

Пример варианта билета на зачёте:

### Вариант № 1

1. Физическая природа колебательных спектров. Области ИК-излучения. Единицы измерения. Правило запрета. Закон поглощения.

Пример варианта билетов на экзамене:

### Вариант № 2

1. Физическая природа колебательных спектров. Области ИК-излучения. Единицы измерения. Правило запрета. Закон поглощения.

2. Масс спектрометрия высокого разрешения. Основные определения, возможность использования в различных системах ионизации и разделение ионов.

## **7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.**

### **а) основная литература:**

Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Ч. 3: Молекулярная спектроскопия / М.А. Ельяшевич. – 5-е изд. – М.: Кн. Дом «ЛИБРОКОМ», 2009. – 527 с.

Трифонов, Р.Е. Моделирование структуры и свойств молекул методами молекулярной механики и молекулярной динамики: Учебное пособие / Р.Е. Трифонов, В.А. Островский. СПбГТИ(ТУ). Каф. хим. технологии орг. соед. азота. – СПб., 2011. – 52 с.

Грибов, Л. А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: Учебное пособие / Л. А. Грибов. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 310 с.

Островский, В.А. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса в химии органических азотсодержащих соединений. 1. Основы метода, интерпретация спектров <sup>1</sup>H ЯМР: Метод. Указания / В.А. Островский, Р.Е. Трифонов. СПбГТИ(ТУ). Каф. хим. технологии орг. соед. азота. – СПб., 2011. – 27 с.

### **б) дополнительная литература:**

Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. - М.: Мир, ООО «Издательство АСТ», 2003. – 683 с.

Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии / А.Т. Лебедев. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. - 493 с.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков: Учебник для химических спец. Вузов / Ю.М. Воловенко [и др.]; - М.: ICSPF PRESS, 2011. – 694 с.

### **в) вспомогательная литература:**

Казицина, Л.А. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. / Л.А. Казицина, Н.Б. Куплетская. – М.: Высшая школа, 1971. – 264 с.

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

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать интернет-ресурсы:

проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

Учебный план РПД и учебно-методический материал; <http://media.technolog.edu.ru>

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

Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>

Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>

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

«Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

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

Дисциплина обеспечена необходимой литературой и учебными пособиями. При чтении лекций используются презентации, слайды рисунки и схемы, представляемые с помощью мультимедийного проектора.

Лекционные, практические и лабораторные занятия проводятся в специализированных аудиториях и лабораториях. Лекционная аудитория оснащена мультимедийной системой с комплектом презентаций и видеофильмов.

Практические занятия проводятся в специализированной аудитории, снабженной персональными компьютерами, программным обеспечением для выполнения обработки экспериментальных данных.

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к лабораторным и практическим занятиям;
- работу с интернет-источниками;
- посещение научных семинаров и конференций, проводимых в Санкт-Петербурге;
- подготовку к сдаче зачётов и экзаменов.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, пройденный на семинарских занятиях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в «Рабочей программе». По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в «Рабочей программе» дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Все виды занятий по дисциплине преподаватели должны проводить в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 016-2015 КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

СТП СПб ГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Практические и семинарские занятия. Общие требования к организации и проведению.

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

СТП СПб ГТИ 040-2002. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования. Утв. Ректором 17.05.2002;

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению. Утв. Ректором 11.12.2009;

Планирование времени, необходимого для изучения 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 студентов должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

С целью более эффективного усвоения студентами материала данной дисциплины рекомендуется при проведении занятий использовать мультимедийные ресурсы, а также ресурсы сети интернет.

Устный опрос проводится с целью определения качества усвоения лекционного материала.

На контрольных мероприятиях студентам предлагается ответить на 2 вопроса по материалам учебной дисциплины. Оценка проставляется в зачетную книжку.

## **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 электронной почты
- информационные справочные системы Scirus.com. SciFinder, Reaxys

Для расширения знаний по теме обучения рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как, [www.yandex.ru](http://www.yandex.ru), [www.google.ru](http://www.google.ru) и других, и использовать материалы Интернет-ресурсов профильных организаций, рекомендованных преподавателем.

Возможна сдача электронного варианта отчетов, рефератов, литературных обзоров и др. по электронной почте, обмен информацией по социальным сетям.

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

Пакеты прикладных программ стандартного набора (Microsoft Office).  
(Microsoft Excel; Microsoft Word; Microsoft PowerPoint).  
Проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

### **10.3. Информационные справочные системы.**

- Электронно-библиотечные системы, предлагаемые библиотекой СПбГТИ(ТУ).
- Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»,
- «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
- Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>
- Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>
- «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».
- «Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Наименование организации – ООО РУНЭБ.

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

- Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники на 50 посадочных мест.
- Для проведения лабораторных занятий используется синтетический практикум, рассчитанный на 30 рабочих мест, оборудованный для проведения химических синтезов.

Кафедра оснащена необходимым научно-исследовательским оборудованием, измерительными и вычислительными комплексами и другим материально-техническим обеспечением, необходимым для полноценного прохождения учебного процесса.

## **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 28.08.2014 г.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине «Современные методы  
исследования веществ и материалов»**

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

<b>Компетенции</b>		
<b>Индекс</b>	<b>Формулировка</b>	<b>Этап формирования</b>
ОК-1	Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	
ОПК-2	Способность профессионально использовать современное технологическое и аналитическое оборудование, способностью к проведению научного исследования и анализу полученных при его проведении результатов.	промежуточный
ПК-11	Способность применять современные методы исследования, проводить стандартные и сертификационные испытания материалов, изделий и технологических процессов.	промежуточный
ПК-12	Способность планировать и проводить необходимый эксперимент, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты.	промежуточный
ПСК-1.2	Способностью разрабатывать методики и программы проведения исследований индивидуальных и смесевых высокоэнергетических композиций. Их испытаний и контроля параметров технологического процесса их получения	промежуточный

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

<b>Показатели оценки результатов освоения дисциплины</b>	<b>Планируемые результаты</b>	<b>Критерий оценивания</b>	<b>Компетенции</b>
Освоение раздела № 1	Знает основные физико-химические методы анализа Умеет интерпретировать полученные экспериментальные результаты Владеть навыками работы на оборудовании	Правильные ответы на вопросы № 1-5 к зачету и экзамену	ОПК-2
	Знает классификацию современных ФХМА. Умеет использовать базовые знания в ФХМА Владеет навыками выполнения теоретических и экспериментальных исследований.	Правильные ответы на вопросы № 1-5 к зачету и экзамену	ОПК-2

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 2	Знает базовые понятия УФ-спектроскопии Умеет использовать знания физических основ метода. Владеет навыками самостоятельного решения поставленных задач в исследованиях.	Правильные ответы на вопросы № 6-14 к зачету и экзамену	ПК-11
	Знает устройство и принципы действия спектрометров. Умеет анализировать и обобщать предъявляемый материал. Владеет техникой эксперимента и расшифровкой спектров.	Правильные ответы на вопросы № 6-14 к зачету и экзамену	ПК-11
Освоение раздела № 3	Знает базовые понятия ИК-спектроскопия. Умеет использовать знания физических основ метода. Владеет техникой эксперимента и расшифровкой спектров.	Правильные ответы на вопросы № 15-19 к зачету и экзамену	ПК-12
	Знает устройство и принципы действия спектрометров. Умеет анализировать и обобщать предъявляемый теоретический материал. Владеет навыками самостоятельного решения поставленных задач в исследованиях.	Правильные ответы на вопросы № 15-19 к зачету	ПК-12
Освоение раздела № 4	Знает базовые понятия ЯМР-спектроскопии. Умеет использовать знания физических основ метода. Владеет техникой эксперимента и расшифровкой спектров.	Правильные ответы на вопросы № 20-27 к зачету и экзамену	ПСК-1.2
	Знает устройство и принципы действия спектрометров. Умеет анализировать и обобщать предъявляемый теоретический материал. Владеет навыками самостоятельного решения поставленных задач в исследованиях.	Правильные ответы на вопросы № 20-27 к зачету и экзамену	ПСК-1.2
Освоение раздела № 5	Знает базовые понятия хроматографии Умеет использовать знания физических основ метода. Владеет техникой эксперимента и расшифровкой и обработка хроматограмм.	Правильные ответы на вопросы № 28-32 к зачету и экзамену	ОПК-2
	Знает устройство и принципы действия газовых и жидкостных хроматографов. Умеет анализировать и обобщать предъявляемый теоретический материал. Владеет навыками самостоятельного решения	Правильные ответы на вопросы № 28-32 к зачету и	ОПК-2

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
	поставленных задач в исследованиях.	экзамену	
Освоение раздела № 6	Знает базовые понятия масс-спектрометрии Умеет использовать знания физических основ метода. Владеет расшифровкой и обработкой масс-спектров.	Правильные ответы на вопросы № 33-36 к зачету и экзамену	ОК-1
	Знает устройство и принципы действия приборов. Умеет анализировать и обобщать предъявляемый теоретический материал. Владеет навыками самостоятельного решения поставленных задач в исследованиях.	Правильные ответы на вопросы № 33-36 к зачету и экзамену	ОК-1
Освоение раздела № 7	Знает основные типы масс-спектрометров Умеет использовать знания физических основ метода. Владеет расшифровкой и обработкой масс-спектров.	Правильные ответы на вопросы № 37-40 к зачету и экзамену	ПСК-1.2
	Знает устройство и принципы действия различных масс-спектрометров. Умеет анализировать и обобщать предъявляемый теоретический материал. Владеет навыками самостоятельного решения поставленных задач в исследованиях.	Правильные ответы на вопросы № 37-40 к зачету и экзамену	ПСК-1.2

### 3. Контрольные вопросы к зачёту и экзамену по дисциплине

1. Задачи и значимость инструментальных методов анализа для современной органической химии. История развития физико-химических методов анализа. Особенности применения современных аналитических приборов.
2. Физические основы поглощения света веществом. Происхождение электронных спектров. Основное и возбужденные состояния. Разрешенные и запрещенные переходы. Принцип Франка-Кондона.
3. Природа цвета. Спектры поглощения и испускания. Зависимость цвета предмета от длины волны поглощенного света. Хромофорные группы: типы и общая классификация. Диапазоны э.м. излучения.
4. Типы электронных переходов. Общая характеристика переходов. Особенности проявления в УФ-спектре. Синглетные и триплетные переходы. Правило отбора электронных переходов.
5. Закон поглощения Бугера. Основные параметры, входящие в закон поглощения. УФ-спектр и его характеристики. Точность, правильность и воспроизводимость УФ-спектральных характеристик.
6. УФ-спектры многокомпонентных систем. Изобестическая точка. Применение УФ-спектроскопии для изучения химических и физико-химических процессов.
7. Приборы для записи УФ-спектров: типы, важнейшие характеристики (показатели), компоненты.

8. Влияние растворителя на УФ-спектры. Колебательная структура спектров. Прозрачность растворителей. Основные характеристики УФ-спектров. Изменения спектров поглощения под влияние внешних факторов.
9. Характеристичное поглощения разных классов органических соединений: алифатические соединения, алкены, алкины, карбонильные соединения, ароматические соединения.
10. Взаимосвязь структуры вещества с электронным спектром. Внутримолекулярные взаимодействия в органических молекулах, их связь с интенсивностью и областью поглощения. Аукохромы.
11. Применение УФ-спеткроскопии для качественного и количественного анализа органических молекул. Установление особенностей структуры молекул.
12. Электронные спектры органических нитросоединений. Типы переходов и их проявление в спектре. Влияние растворителя. Алифатические и ароматические нитросоединения: особенности проявления в спектре.
13. Физическая природа колебательных спектров. Области ИК-излучения. Единицы измерения. Правило запрета. Закон поглощения.
14. Типы колебаний. Двухатомная молекула (группа атомов). Трехатомная группа атомов. Колебания сложных систем. Взаимосвязь частоты колебаний с характеристиками химической связи и типами атомов.
15. ИК-спектр. Основные понятия. Характеристики спектра. Области спектра. Закон поглощения ИК-излучения веществом.
16. Принципы работы ИК-спектрометров. Особенности принципа действия ИК-спектрометра с преобразованием Фурье. Ключевые характеристики современных приборов.
17. Колебательные спектры нитросоединений. Алифатические, ароматические нитросоединения, нитраминаы. Характеристические колебания нитро-группы. Влияние различных факторов на смещение полос поглощения в спектрах.
18. Основные подходы к интерпретации ИК-спектров. Различные типы связей и их проявления в спектрах. Ошибки в записи спектров: их распознавание и методы исправления.
19. ИК-спектры основных классов органических соединений: алифатические, ароматические соединения, алкены, алкины, amino-производные, карбоновые кислоты, карбонильные соединения, спирты и проч.
20. Методы приготовления образцов для ИК-спектроскопии. Применение метода для качественного и количественного анализа.
21. ИК-спектроскопия НПВО. Основные понятия и принципы. Преимущества метода для практического применения.
22. Физические основы метода ЯМР. Магнитные свойства ядер. Магнитное экранирование и химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие.
23. Аппаратура и техника спектроскопии ЯМР. Основные принципы действия, базовые характеристики приборов.
24. Спектры ЯМР на различных ядрах:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $\text{N}$ . Взаимосвязь структуры вещества с ЯМР спектром. Характеристики сигнала ЯМР спектра.
25. Применение спектроскопии ЯМР для качественного и количественного анализа, а также исследования различных физико-химических процессов и механизмов химических реакций.
26. Основы хроматографических методов анализа. Классификация методов по различным критериям, история открытия и развития метода. Основные понятия и определения.
27. Тонкослойная хроматография. Основные понятия. Метод проведения анализа, характеристики сорбентов. Величины  $R_f$  и  $R_s$ : методы определения и взаимосвязь. Способы «проявления» хроматограмм.

28. Газовая хроматография. Основные понятия, типы хроматографических колонок, методы влияния на эффективность разделения компонентов смеси, системы детекции.
29. Жидкостная хроматография высокого давления. Основные понятия, типы хроматографических колонок, методы влияния на эффективность разделения компонентов смеси, системы детекции.
30. Хроматограмма и хроматографический пик. Основные характеристики хроматограмм и эффективность хроматографического разделения. Качественный и количественный анализ хроматографическими методами.
31. Основные определения и понятия масс-спектрометрии. История развития метода. Принцип действия простейших масс-спектрометров.
32. Масс-спектр: основные характеристики спектров, информация, доступная для анализа. Проявление изотопного соотношения в масс спектре.
33. Система ввода в масс-спектрометр. Основные типы, применимость для различных анализируемых объектов. Принцип действия, преимущества и недостатки метода.
34. Принципиальная схема масс спектрометра. Системы ионизации: классификация, основные характеристики, применимость к различным классам анализируемых объектов.
35. Особенности ионизации электронным ударом и последующей фрагментации органических молекул в зависимости от структур.
36. Особенности ионизации методами электроспрей и MALDI. Мультизаряженные ионы.
37. Основные типы и принципы действия масс-анализаторов. Точность и применимость к анализу различных объектов. Детекторы ионов.
38. Тандемная масс-спектрометрия. Основные принципы, применимость к анализу сложных и многокомпонентных объектов.
39. Масс спектрометрия высокого разрешения. Основные определения, возможность использования в различных системах ионизации и разделение ионов.
40. Масс спектрометрия высокого разрешения. Разрешение и точность определения масс.

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

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.