

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 16.05.2024 13:02:41
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

Физико-химические методы исследования структуры органических соединений

Закреплена за кафедрой: **Органической химии**

Направление подготовки: **04.03.01 Химия**

Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия**

Квалификация: **Бакалавр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **5,6**

Программу составил(и):
д-р хим. наук, зав. кафедрой, Ворончихина Людмила Ивановна

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Целью освоения дисциплины является – научить студента-органика устанавливать структуру органических соединений по его спектральным характеристикам.

Задачи:

Задачами освоения дисциплины являются:

- изучение спектроскопических методов исследования структуры органических соединений - спектроскопия ультрафиолетовая, инфракрасная и спектроскопия ядерного магнитного резонанса;
- освоение методики установления структуры органических соединений по его спектральным характеристикам.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Физическая химия

Методика научного исследования

Органическая химия

Физика

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Научно-исследовательская работа

Физические методы исследования

Коллоидная химия

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	5 ЗЕТ
Часов по учебному плану	180
в том числе:	
аудиторные занятия	70
самостоятельная работа	83
часов на контроль	27

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)

ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	6

зачеты	5
--------	---

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Введение. Предмет и задачи курса. Спектроскопия как средство исследования органических молекул.					
1.1	Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии (ИК, УФ, КР), ядерной спектроскопии (ЯМР, ЯКР), спектроскопии ЭПР и использование их как средств исследования органических соединений.	Лек	5	1		
1.2	Применение ЭВМ для установления строения органических соединений.	Лаб	5	1		
1.3	Новые возможности в исследовании органических веществ, гамма-резонансная спектроскопия (мессбауэровская), фотоэлектронная и рентгеноэлектронная спектроскопия, рентгеноструктурный и электронографический методы.	Ср	5	10		
	Раздел 2. Тема 1. Общие сведения о спектрах					
2.1	Характеристика электромагнитного излучения. Основные параметры: длина волны, частота, волновое число.	Лек	5	6		
2.2	Область оптических спектров: ИК-область, видимая и ультрафиолетовая. Законы поглощения света.	Лаб	5	6		
2.3	Объединенный закон Ламберта-Бэра. Способы изображения спектров поглощения	Ср	5	10		
	Раздел 3. Тема 2. Инфракрасная спектроскопия					

3.1	Происхождение спектров. Колебания и спектры двух- и многоатомных молекул. Число полос в спектре. Нормальные колебания. Скелетные и групповые частоты (характеристические).	Лек	5	4		
3.2	Экспериментальные данные по классам органических соединений. Общие сведения о спектроскопии комбинационного рассеяния (СКР). Происхождение спектров СКР и необходимость их применения для полной характеристики колебаний молекул.	Лаб	5	4		
3.3	Связь колебательных спектров со строением органических соединений. Анализ частот некоторых групп.	Ср	5	10		
	Раздел 4. Тема 3. Электронные спектры органических молекул					
4.1	Основные вопросы, решаемые с помощью УФ-спектроскопии. Происхождение электронных спектров. Классификация электронных переходов.	Лек	5	6		
4.2	Электронные спектры основных классов органических соединений. Ненасыщенные соединения, карбонильные соединения. Эффекты сопряжения в электронных спектрах: бутадиен, винилоли, полиены C=C-C=O. Эмпирические правила вычисления максимумов λ_{max} полос поглощения в сопряженных системах (правило Вудворда).	Лаб	5	6		
4.3	Терминология и обозначения, применяемые в электронной спектроскопии: батохромный (красный) и гипсохромный (синий) сдвиги, сольватохромные эффекты, хромофоры, ауксохромы.	Ср	5	8		
	Раздел 5. Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР)					

5.1	Основы метода ЯМР. Магнитные свойства ядер. Явление ЯМР в классической трактовке. Принципиальная схема простейшего ЯМР-спектрометра. Химический сдвиг и его измерение.	Лек	6	6		
5.2	Внешние и внутренние эталоны. Различные шкалы химических сдвигов и соотношение между ними. Использование химических сдвигов в структурном анализе.	Лаб	6	6		
5.3	Таблицы химических сдвигов. Расчет химических сдвигов протонов по аддитивной схеме. Тонкая структура сигналов ЯМР и ее происхождение. Спин-спиновое взаимодействие. Основные сведения о возможности применения ЯМР C^{13} , P^{31} , F^{19} и др.	Ср	6	10		
	Раздел 6. Тема 5. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)					
6.1	Физическая природа явлений. Вид спектров ЭПР простейших радикалов. Возможности использования ЭПР в органической химии.	Лек	6	6		
6.2	Масс-спектроскопия. Молекулярная масса и определение молекулярной формулы. Масс-спектроскопический распад.	Лаб	6	6		
6.3	Происхождение и интерпретация масс-спектров	Ср	6	20		
	Раздел 7. Тема 6. Рефрактометрические методы					
7.1	Показатель преломления и удельная рефракция. Поляризуемость и ее связь с удельной и молекулярной рефракцией. Структурные инкременты и групповые рефракции.	Лек	6	6		
7.2	Применение молекулярной рефракции для определения строения органических соединений, особенности структуры, выявляемые с помощью молекулярной рефракции	Лаб	6	6		

7.3	Рефракции связей. Соотношения между рефракциями связей и атомными рефракциями. Границы приложимости аддитивной схемы экзальтации молекулярной рефракции.	Ср	6	15		
	Раздел 8. Контроль					
8.1	Контроль	Экзамен	6	27		

Образовательные технологии

Список образовательных технологий

1	Проектная технология
2	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, форум-интервью и т.д.)
3	Игровые технологии
4	Активное слушание

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Оценочные материалы для проведения текущей аттестации приведены в приложении 2

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации приведены в приложении 2

8.3. Требования к рейтинг-контролю

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	OpenOffice
5	WinDjView

9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Репозиторий ТвГУ
2	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)

3	ЭБС ТвГУ
4	ЭБС VOOK.ru
5	ЭБС «Лань»
6	ЭБС IPRbooks
7	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
8	ЭБС «ЮРАИТ»
9	ЭБС «ZNANIUM.COM»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-405	комплект учебной мебели, насос ВНВП, роторный испаритель, компьютер, горелка, шкаф, эл. печь

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические материалы приведены в приложении 1 и 3

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Образовательные технологии:

1. Проектная технология
2. Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)

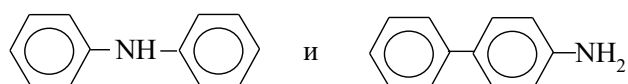
ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ И УПРАЖНЕНИЙ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

1. В ЯМР-спектре соединения, имеющего состав C_2H_4Br , имеется дублет в сильном поле 2,5 м.д. и квартет в слабом поле 5,8 м.д. с соотношением площадей 3:1. Какое строение имеет соединений?
2. Напишите структуры соединений $C_3H_3Cl_5$ (а) и $C_3H_3Cl_3$ (б), которым соответствуют следующие данные ЯМР: а) триплет 4,52 м.д. и дублет 6,07 м.д. с соотношением площадей сигнала протона 1:2; б) синглет 2,20 м.д. и дублет 4,02 м.д. с соотношением площадей 3H : 2H.
3. Предложите структурные формулы веществ состава C_8H_7OCl и их ИК-характеристики.
4. Вещество состава $C_8H_{10}O$ имеет два изомера. Предложите их структуры и укажите данные их ПМР-спектров.

5. Определите структурную формулу соединения состава C_7H_8SH , если в спектре ЯМР этого соединения обнаружены сигналы при 7,2; 3,27; 2,30 м.д.
6. Предскажите ИК- и ЯМР-спектры соединений: $CH_3C_6H_4-OCH_2CH_3$ и $C_6H_5CH_2OCH_2CH_3$.
7. Укажите различия в ИК-спектрах ацетона, ацетоуксусного эфира и ацетофенона.
8. Предскажите структуру и спектральные данные соединения состава $C_3H_3Cl_5$.
9. Как различить по ИК- и ЯМР-спектрам толуол, *n*-ксилол и мезитилен.
10. Соединения $CHCl_2-CHCl_2$ ($\delta=6,0$ м.д.) и CCl_3-CH_2Cl ($\delta=3,9$ м.д.) дают в ЯМР-спектрах синглеты. Объясните происхождение синглетов и различия в химических сдвигах.
11. При комнатной температуре циклогексан имеет один пик в ЯМР-спектре. При температуре до $-70^\circ C$ сигнал уширяется, а при $-100^\circ C$ разделяется четко на два пика. Объясните наблюдаемое явление.
12. Исследуемое соединение содержит метильную и метиленовую группы и растворяется в воде, метаноле, этаноле, CCl_4 , $CHCl_3$, бензоле, ацетоне. Какие из названных растворителей следует использовать для записи спектров ЯМР?
13. Предложите ИК- и ЯМР-спектральные характеристики для бензилацетата.
14. Как с помощью ЯМР-спектров различить соединения состава $C_2H_3Cl_3$?
15. Как с помощью ИК-спектров различить ацетилацетон, диметилсульфоксид и ацетон?
16. Определите структуру соединения C_8H_8O , если в спектре присутствуют следующие полосы поглощения: 1680 (с.); 1600 (ср.); 1580 (ср.); 1450 (ср.); 1360 (с.); 1265 (с.); 755 (с.); 690 (с.) cm^{-1} .
17. Фенол с диоксаном образует водородную связь. Предскажите, как изменится прочность такой водородной связи при введении в молекулу фенола следующих заместителей: *n*- CH_3 ; *m*- Cl ; *n*- Cl ; *n*- NO_2 ; *m*- CH_3O ; *n*- CH_3O .

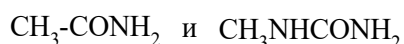
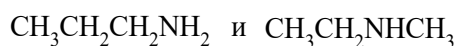
18. В ИК-спектре цис 1,2-циклопентандиола полоса поглощения ОН-группы имеет более низкую частоту, чем полоса поглощения свободной ОН-группы; и эта полоса не исчезает даже при сильном разбавлении. Приведите возможные объяснения.
19. В какие функциональные группы входят атомы кислорода и азота в соединении с брутто формулой $C_7H_{13}N_3O_7$, если в ИК-спектре наблюдаются интенсивные полосы при 1590 см^{-1} и 1330 см^{-1} , широкая полоса в области $3500\text{-}3360\text{ см}^{-1}$ и полосы при 1125 и 1047 см^{-1} .
20. В ИК-спектре ацетилацетона наблюдаются следующие полосы поглощения: 1730 ; 1680 ; 1640 см^{-1} . Сделайте отнесение этих полос, учитывая таутомерию соединения.
21. В ПМР-спектре лаурокса-9 (неионогенное ПАВ общей формулы $C_{11}H_{23}COO(C_2H_4O)_nH$, где $n_{cp}=9$) обнаружены следующие сигналы, δ м.д.: $0,80$; $1,20$; $2,15$; $3,40$; $4,0$; $2,85$; а в ИК-спектре имеются полосы поглощения, см^{-1} : 3400 , 2930 , 2860 , 1740 , 1380 , 720 , 1355 , 1055 , 1115 . Сделайте отнесение полос и сигналов в спектрах лаурокса-9.
22. В ИК-спектре синтанола ДС-10 (неионогенное ПАВ общей формулы $RO(C_2H_4O)_nH$, где $n_{cp}=10$) имеются следующие полосы поглощения, см^{-1} : 3450 , 2870 , 2935 , 1465 , 725 , 1350 , 1050 , 1100 и в ПМР-спектре следующие сигналы δ м.д.: $0,80$; $1,20$; $3,45$; $4,05$.
23. Какие полосы поглощения в ИК-спектре и резонансные сигналы протонов в ЯМР-спектре можно предсказать для лаурата натрия (анионное ПАВ общей формулы $C_{12}H_{23}O_2Na$).
24. В ПМР-спектре лаурата моноэтаноламмония (растворитель CCl_4), анионное ПАВ общей формулы $C_{14}H_{31}O_3N$, имеются следующие сигналы δ м.д.: $0,84$; $1,24$; $2,0$; $2,82$; $3,56$; $7,6$ с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3 , 8 , 2 , 2 , 2 , 4 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения, см^{-1} : 3300 , 3050 , 2960 , 2930 , 2860 , 1560 , 1425 , 1465 , 1380 , $1180\text{-}1350$, 725 . Сделайте отнесение данных ИК- и ПМР-спектров в соответствии со структурой соединения.
25. Предложите ИК- и ПМР-спектры для октилсульфоната натрия (анионное ПАВ общей формулы $C_8H_{17}SO_3Na$).

26. Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилсульфата натрия (анионное ПАВ общей формулы $C_{10}H_{21}SO_4Na$).
27. В ПМР-спектре моноцетилфосфата натрия (анионное ПАВ общей формулы $C_{16}H_{33}PO_4Na_2$) имеются следующие сигналы, δ м.д.: 0,80; 1,20; 3,65 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 28, 2 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения, cm^{-1} : 2965, 2930, 2860, 1470, 1380, 1160, 1140, 1080, 1110, 1010, 725. Соотнесите данные спектров со структурой соединения.
28. В ИК-спектре N-децилпиридиний хлорида (катионное ПАВ общей формулы $C_{15}H_{26}NCl$) имеются следующие полосы поглощения, cm^{-1} : 3025, 2930, 2860, 1635, 1585, 1505, 1490, 1470, 1380, 780, 685, 720. В ПМР-спектре имеются следующие сигналы протонов, δ м.д.: 0,81; 1,20; 1,85; 4,70; 8,26; 8,71; 9,40 с интегральными интенсивностями 3, 8, 2, 2, 2, 1, 2 соответственно. Сделайте вывод о структуре соединения и предложите отнесение сигналов и полос в молекуле.
29. Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилбензилдиэтиламмоний хлорида (катионное ПАВ общей формулы $C_{21}H_{38}NCl$).
30. Предложите ИК-, УФ- и ЯМР-спектральные данные для N-бензилпиперидиний хлорида (катионное ПАВ общей формулы $C_{23}H_{37}NCl$).
31. В анилине хромофором является не только бензольное кольцо, но и неподеленная электронная пара азота. Оба хромофора сопряжены друг с другом. Образование соли при действии разбавленной серной кислоты изменяет спектр анилина. В УФ-спектре анилина обнаружена поглощение при 286 нм и 234 нм. Сделайте отнесение полос и объясните отличия в положении главных полос соли анилина ($\lambda=254$ нм).
32. Строение органического соединения общей формулы $C_{12}H_{11}N$ может быть представлено следующими двумя структурами:



Предложите данные ИК-спектров для различия этих структур

33. Как можно различить следующие соединения, используя ИК-спектральные данные:



КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЗАЧЕТА

1. Используя таблицу хромофорных групп, решить, можно ли использовать спирты в качестве растворителей в УФ-спектроскопии.
2. Почему полосы поглощения в УФ-спектрах значительно шире, чем в ИК-спектрах?
3. На что следует обращать внимание, если снимается ИК-спектр твердого вещества в виде раствора?
4. Какое значение имеют характеристические частоты в ИК-спектроскопии?
5. Укажите границы в электромагнитном спектре для ультрафиолетовой области.
6. Какие группы атомов называют хромофорами?
7. Приведите примеры наиболее часто встречающихся хромофоров.
8. Что называется батохромным сдвигом? Гипсохромным сдвигом?
9. В каких системах наблюдается батохромный сдвиг? Сделать таблицу хромофорных групп.
10. какая концентрация растворов является наиболее оптимальной для снятия УФ-спектров?
11. Какие растворители принято считать идеальными для снятия УФ-спектров?
12. Почему УФ-спектры называют электронными спектрами?
13. Дайте определение термину «волновое число».
14. Что выражает собой термин «волновое число»?
15. Что называют оптической плотностью?
16. Напишите выражение для закона Ламберта – Бера.
17. Дайте определение молярному коэффициенту поглощения.
18. От каких факторов зависит точное положение максимума поглощения?
19. Укажите границы области инфракрасной спектроскопии.
20. Переведите область длин волн от 25 до 2,5 мкм в волновые числа.

21. Почему инфракрасные спектры называют колебательными?
22. Какие колебания называют валентными, деформационными?
23. Какие поглощения называют характеристическими?
24. Какие вопросы решаются с помощью ИК-спектроскопии?
25. Назовите основные области ИК-спектра.
26. Какую область ИК-спектра называют «областью отпечатков пальцев»?
27. Почему в УФ-спектроскопии при снятии спектра необходимо точно указывать молярную концентрацию и толщину слоя исследуемой пробы в отличие от ИК-спектроскопии?
28. В каких единицах выражают концентрацию раствора при снятии УФ-спектров?
29. Как обычно готовят разбавленные растворы для снятия УФ-спектров?
30. Почему при снятии ^{13}C ЯМР-спектров растворы должны быть как можно более концентрированными?
31. Какие растворители используют при снятии ^1H ЯМР-спектров?
32. Как можно снять ИК-спектр твердого вещества?
33. Какие методы подготовки образцов для снятия ИК-спектров вы знаете?
34. Почему необходимо обеспечивать высокую чистоту ампулы и растворителя при снятии ЯМР-спектров?
35. Какие колебания в ИК-области следует относить к валентным, а какие к деформационным?
36. Чем вызвано появление в ИК-спектре большого количества полос деформационных колебаний?
37. При снятии ПМР-спектров можно использовать внутренний или внешний стандарт (эталонное вещество). Назовите эти вещества.
38. Что выражает термин «интегральная интенсивность» в ЯМР-спектроскопии?
39. В каких единицах измеряются смещения резонансных сигналов протонов в ПМР-спектрах?
40. Какие шкалы резонансных сигналов протонов вы знаете?
41. Что выражает собой электронный спектр поглощения вещества?

ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ИТОГОВОГО ЭКЗАМЕНА

1. Спектроскопия как средство исследования органических молекул.
2. Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии.
3. Характеристика электромагнитного излучения. Основные параметры.
4. Область оптических спектров: ИК-, видимая и ультрафиолетовая.
5. Законы поглощения света. Объединенный закон Ламберта – Бера.
6. Происхождение ИК-спектров. Нормальные колебания.
7. Связь колебательных спектров со строением органических соединений.
8. Основные вопросы, решаемые с помощью УФ-спектроскопии.
9. Происхождение электронных спектров. Основные хромофоры.
10. Эффекты сопряжения в электронных спектрах.
11. Основы метода ЯМР. Явление ЯМР в классической трактовке.
12. Химический сдвиг и константа Спин-спинового взаимодействия.
13. Использование химических сдвигов в структурном анализе.
14. Физическая природа происхождения спектров ЭПР.
15. Масс-спектроскопия. Происхождение и интерпретация спектров.
16. Рефрактометрические методы и их применение для определения строения органических соединений.
17. Спектроскопия ^{13}C – ЯМР. Основы метода. Применение в органической химии.
18. Способы изображения спектров.
19. Условия измерения спектров поглощения в ИК-области.
20. Растворители, применяемые при измерении электронных спектров поглощения. Влияние растворителей на спектр.
21. Измерение спектров протона магнитного резонанса.

ОБРАЗЦЫ ЭКЗАМЕНАЦИОННЫХ БИЛЕТОВ

Билет №

1. Законы поглощения света.
2. Структурные изомеры бензиламин и *m*-толуидин имеют различные ^1H ЯМР-спектры. Укажите спектральные особенности и сделайте примерное отнесение сигналов.

3. Слезоточивая жидкость $C_4H_9Cl_2$ имеет следующие спектральные характеристики: в ЯМР-спектре наблюдается сигнал при 4,2 м.д. (в CCl_4); в ИК-спектре проявляются полосы при $\nu \approx 2960$ (сл.); 1430 (ср.); 1265 (о.с.); 1165 (с.); 710 (о.с.) cm^{-1} . Определите структуру соединения.

Билет №

1. Использование химических сдвигов в структурном анализе.
2. Какие изменения можно ожидать в УФ-спектре анилина при добавлении в раствор HCl?
3. Твердое вещество $C_8H_4N_2$ имеет следующие спектральные характеристики: в ЯМР-спектре синглет при 7,8 м.д.; в ИК-спектре $\nu = 3100$ (сл.); 2240 (с.); 1600 (сл.); 1570 (сл.); 1495 (ср.); 1300 (сл.); 1200 (сл.); 960 (сл.); 770 (с.) cm^{-1} . В УФ-спектре λ_{max} (в этаноле) 283 и 292 нм ($\epsilon = 1600$ и 1820 соответственно). Определите строение этого соединения.

Билет №

1. Происхождение ИК-спектров. Нормальные колебания.
2. Проводя реакцию нитрования бензола, студент при приготовлении нитрующей смеси по ошибке вместо концентрированной серной кислоты использовал фосфорную. В ИК-спектре продукта нитрования обнаружены следующие полосы, cm^{-1} : 3080, 2960, 1600, 1460, 1540, 1345, 1310, 780, 850, 690, а в ПМР-спектре этого вещества наблюдается единственный сигнал – мультиплет в области 7,5-8,2 м.д. На основании спектральных данных определите, удалось ли студенту получить нитробензол.
3. Как с помощью ПМР-спектров различить диметилкетон, диэтиловый эфир?

Требования к рейтинг-контролю (для экзамена)

Модули	Темы	Виды работ	Баллы
5 семестр			
I модуль	Тема 1. Общие сведения о спектрах	Самостоятельная работа	20

		Лабораторные работы	20
	<i>Тема 2. Инфракрасная спектроскопия</i>	Лабораторные работы	20
II модуль		Самостоятельная работа	20
	<i>Тема 3. Электронные спектры органических молекул</i>	Лабораторные работы	10
		Самостоятельная работа	10
	Зачет		100
6 семестр			
I модуль	Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР)	Самостоятельная работа	10
		Лабораторные работы	10
	Тема 5. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)	Самостоятельная работа	10
II модуль	Тема 6. Рефрактометрические методы	Лабораторные работы	10
		Самостоятельная работа	10
		Лабораторные работы	10
	Итого		60
	Экзамен		40
ВСЕГО:			100

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

ТИПОВЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РЕЙТИНГОВОГО КОНТРОЛЯ

5 семестр, I модуль

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
3050, 2220, 1600, 1500, 1510, 1480, 858, 830, 730

- а) *n*-нитробензамид
- б) нитрил *m*-аминобензойная кислота
- в) нитрил *n*-нитрофенилуксусная кислота

Задание №2

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
3200-3000, 1680, 1620, 1580, 1500, 1450, 980, 935, 765, 708

- а) фенилуксусная кислота
- б) амид *n*-хлоркоричной кислоты
- в) коричная кислота

Задание №3

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
3320, 2940, 1600, 1460, 1380, 1210

- а) бензиловый спирт
- б) пропиловый спирт
- в) уксусная кислота

Задание №4

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
2870, 2220, 1465, 1420, 1380, 1200

- а) *n*-метоксибензнитрил
- б) ацетиленкарбоновая кислота

в) нитрил метоксипропионовой кислоты

Задание №5

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см^{-1} :

3280, 2940, 1460, 1375, 1355

а) диметилкарбинол

б) *n*-хлорбензойная кислота

в) диметиланилин

Задание №6

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см^{-1} :

2940, 2230, 1440, 1380

а) нитрил фенилуксусной кислоты

б) нитрил пропионовой кислоты

в) ацетиленкарбоновая кислота

5 семестр, II модуль

Задание №7

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см^{-1} :

3010, 2920, 1600, 1500, 1460, 1380, 740

а) диметилбензол

б) бензальдегид

в) уксусная кислота

Задание №8

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см^{-1} :

3030, 2950, 1590, 1500, 1460, 1375, 795

а) *n*-нитробензальдегид

б) *n*-метилтолуол

в) *m*-хлорбензамид

Задание №9

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см^{-1} :

3070, 2930, 1600, 1480, 1430, 735, 690, 705

а) метоксибензол

б) метилфенилсульфид

в) тиофенол

Задание №10

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
3030, 2900, 2550, 805

- а) *o*-нитрофенол
- б) *n*-метилтиофенол
- в) аминоксусная кислота

Задание №11

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
3330, 3030, 2860, 1610, 1500, 1450

- а) бензиловый спирт
- б) бензойная кислота
- в) *n*-аминобензальдегид

Задание №12

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см⁻¹:
3030, 2790, 2760, 1700, 1600, 1580, 1450

- а) бензальдегид
- б) *n*-аминофенол
- в) коричная кислота

6 семестр, I модуль

Задание №1

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра,
м.д.: 7,8; 10,0

- а) *n*-метилбензойная кислота
- б) бензойная кислота
- в) бензальдегид

Задание №2

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра,
м.д.: 2,5; 5,86

- а) 1,2-дибромпропан
- б) хлорэтан
- в) 1,1-дибромэтан

Задание №3

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 3,78; 4,22; 7,0

- а) бензойная кислота
- б) нитробензол
- в) β -хлорэтоксibenзол

Задание №4

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 2,3; 5,6; 7,0

- а) пропанол
- б) бензиловый спирт
- в) *m*-метилфенол

Задание №5

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 2,4; 4,6; 7,3

- а) бензальдегид
- б) бензиловый спирт
- в) (β -гидрокси) этилбензол

Задание №6

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 1,22; 2,3; 2,8; 7,0

- а) метилбензол
- б) *n*-изопропилтолуол
- в) диметилбензол

6 семестр, II модуль

Задание №7

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 3,8; 7,0; 9,8

- а) *m*-метилбензойная кислота
- б) бензиловый спирт
- в) *n*-метоксибензальдегид

Задание №8

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 2,6; 3,97; 7,2

а) (β -гидрокси)этилбензол

б) *n*-этоксibenзол

в) бензиловый спирт

Задание №9

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 2,3; 3,3; 7,2

а) бензмеркаптан

б) *n*-метилтиофенол

в) бензальдегид

Задание №10

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 1,25; 2,7; 7,2

а) толуол

б) этилбензол

в) 1,2-диметилбензол

Задание №11

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 2,3; 7,0

а) 1,4-диметилбензол

б) *n*-метилфенол

в) толуол

Задание №12

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 2,0; 2,0; 4,4

а) пропан

б) бутиламин

в) нитропропан

5.2. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

ПК-1. Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

(код, наименование компетенции)

Номер задания	Правильный ответ (ключ)	Содержание вопроса/задания	Критерии оценивания заданий
Задания закрытого типа			
1	Б	Каковы величина и размерность длины волны? А. Сантиметр. Б. Нанометр. В. Километр. Г. Дециметр.	1 балл за правильный ответ
2	Сильное поле — область спектра «находящаяся справа» при обычном представлении спектров ЯМР.	Что означает термин «сильное поле»?	1 балл за правильный ответ
3	В	Сколько типов неэквивалентных протонов присутствует в молекуле $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{Br}$? А. 4.	1 балл за правильный ответ

		Б. 1. В.2. Г. 3.	
4	Валентные колебания — колебания связанные с изменением длины связи.	Что такое «валентные колебания»?	1 балл за правильный ответ
5	А	Сколько расщеплений можно ожидать для соединения C₂H₆O? А. Один синглет. Б. Дублет. В. Квартет. Г. Триплет.	1 балл за правильный ответ
Задания открытого типа			
6	Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ПМР-спектра, м.д.: 7,8; 10,0: а) п-метилбензойная кислота; б) бензойная кислота; в) бензальдегид?		3 балла
<p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1. Записываем формулы соединений: а) п-СН₃-С₆Н₄-СООН; б) С₆Н₅-СООН; в) С₆Н₅-СНО.</p> <p>2. Определяем число типов протонов: а) 3; б) 2; в) 2.</p> <p>3. Устанавливаем соединение: бензальдегид, по величине 10 м.д. для протона альдегида.</p> <p>Ответ: бензальдегид.</p>			<p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>Итого: 3 балла</p>
7	Какова структура соединения C₃H₆O, если в спектре наблюдается синглет при 2.1 м.д.?		3 балла

<p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1. Записываем предполагаемую формулу: $\text{CH}_3\text{--CO--CH}_3$.</p> <p>2. Определяем число сигналов протонов: 6.</p> <p>3. Устанавливаем истинную формулу: $\text{CH}_3\text{--CO--CH}_3$, так как протоны дают один синглет.</p> <p>Ответ: $\text{CH}_3\text{--CO--CH}_3$.</p>		<p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>Итого: 3 балла</p>
8	<p>Напишите формулу соединения, соответствующую данным ЯМР-спектра: $\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$, дублет, мультиплет.</p>	3 балла
<p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1. Записываем предполагаемую формулу: $\text{CH}_3\text{--CH(Cl)--CH}_3$.</p> <p>2. Определяем число сигналов протонов: 2.</p> <p>3. Устанавливаем истинную формулу: $\text{CH}_3\text{--CH(Cl)--CH}_3$, которая соответствует числу расщеплений: один дублет, один мультиплет.</p> <p>Ответ: $\text{CH}_3\text{--CH(Cl)--CH}_3$.</p>		<p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>Итого: 3 балла</p>
9	<p>Какую структуру имеет соединение: $\text{CH}_3\text{--CH(OH)(NO}_2\text{)}$ или $\text{CH}_3\text{--CHONO}_2$, если в ИК-спектре найдены частоты: 3600; 1550; 1370cm^{-1}.</p>	3 балла
<p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1. Определяем классы соединений: 1-нитро-1-гидроксиэтан и этилнитрат.</p> <p>2. Находим области поглощения групп.</p> <p>3. Согласно данным спектра это соединение: 1-нитро-1-гидроксиэтан.</p> <p>Ответ: 1-нитро-1-гидроксиэтан.</p>		<p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>1 балл</p> <p>Итого: 3 балла</p>
10	<p>Можно ли с помощью ИК-спектров различить соединения: а) $\text{CH}_3\text{--COOCH}_3$ и</p>	3 балла

	б) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$?	
Правильный ответ (ключ):		
1. Определяем классы соединений: а) сложный эфир, б) кислота.		1 балл 1 балл
2. Выделяем функциональные группы: а) C=O и C-O-C , б) C=O и OH .		1 балл
3. Устанавливаем различие по наличию полосы C-O-C в соединении $\text{CH}_3\text{-COOCH}_3$.		
Ответ: сложный эфир – $\text{CH}_3\text{-COOCH}_3$.		
		Итого: 3 балла

ПК-2. Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы.

(код, наименование компетенции)

Номер задания	Правильный ответ (ключ)	Содержание вопроса/задания	Критерии оценивания заданий
<i>Задания закрытого типа</i>			
1	Б	Сколько сигналов следует ожидать в ЯМР-спектре соединения $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$? А. Два. Б. Один. В. Три. Г. Четыре.	1 балл за правильный ответ
2	Химический сдвиг — разность между	Что такое химический сдвиг?	1 балл за правильный ответ

	резонансным и частотами сигнала протона и сигнала стандарта.		
3	Б	Сколько неэквивалентных протонов присутствует в молекуле $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2(\text{NO}_2)$? А. Один. Б. Три. В. Пять. Г. Четыре.	1 балл за правильный ответ
4	Химически эквивалентные протоны — протоны одной молекулы, имеющие одинаковые химические сдвиги.	Что такое химически эквивалентные протоны?	1 балл за правильный ответ
5	А	Какие будут иметь ИК-спектры два энантиомера $(R)\text{-}2\text{-}$ бромбутан и $(S)\text{-}2\text{-}$ бромбутан? А. Одинаковые. Б. Различные.	1 балл за правильный ответ

		В. Подобные. Г. Незначительно различающиеся.	
Задания открытого типа			
6	Какой сигнал и в какой области спектра следует ожидать для соединения $(\text{CH}_3)_3\text{N}$?		3 балла
Правильный ответ (ключ):			
1. Определяем класс соединения – амин.			1 балл
2. Оцениваем количество эквивалентных протонов: 9.			1 балл
3. Сигнал должен быть в области ~ 2 м.д. (синглет).			1 балл
			Итого: 3 балла
7	Предложите структуру соединения C_5H_{12}, которое имеет только один сигнал в ЯМР-спектре.		3 балла
Правильный ответ (ключ):			
1. Записываем структурные формулы: $(\text{CH}_3)_4\text{C}$, C_5H_{12} .			1 балл
2. Определяем число эквивалентных протонов: 12.			1 балл
3. Устанавливаем структура соединения: $(\text{CH}_3)_4\text{C}$.			1 балл
			Итого: 3 балла
8	По данным ИК-спектра подтвердите структуру п-нитробензальдегида: 3100; 1708; 1608; 1580; 1536; 1348cm^{-1}.		3 балла
Правильный ответ (ключ):			
1. Определяем класс соединения: ароматический альдегид.			1 балл
2. Выделяем функциональные группы: CHO ; NO_2 ; C_6H_4 .			1 балл
3. С помощью справочной таблицы определяем положение полос поглощения.			1 балл
			Итого: 3 балла

9	Напишите формулу соединения, соответствующую данным ЯМР-спектра: C₂H₆O (один синглет).	3 балла
<p>Правильный ответ (ключ):</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Запишем структурную формулу: CH₃–O–CH₃. 2. Определяем количество эквивалентных протонов: 6. 3. Оцениваем расщепление протонов: синглет. 		<p>1 балл 1 балл 1 балл</p> <p>Итого: 3 балла</p>
10	Как различить ацетиленкарбоновую кислоту и ацетонитрил по ИК-спектрам?	3 балла
<p>Правильный ответ (ключ):</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Определяем класс соединений: кислота, нитрил. 2. Выделяем функциональные группы в соединениях: COOH – в кислоте; CN – в нитриле. 3. Различить можно по наличию карбоксильной группы в кислоте. 		<p>1 балл 1 балл 1 балл</p> <p>Итого: 3 балла</p>

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

Основная:

1. Молекулярная спектроскопия. Основы теории и практика : учебное пособие / Ф. Ф.Литвин [и др.]; Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2022. - 199 с. - (ЭБС). – Режим доступа: <https://znanium.com/catalog/document?id=399183>
2. Ефимова О. С. Аналитическая спектроскопия [Электронный ресурс] : учебное пособие / О. С. Ефимова, О. Н. Булгакова, Г. О. Еремеева. - Кемерово : КемГУ, 2022. - 113 с. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/309074>

Дополнительная:

1. Ципотан А. С. Оптическая спектроскопия твердого тела : учебное пособие / А. С. Ципотан, Н. В. Слюсаренко . - Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2022. - 56 с. - ВО - Бакалавриат. – Режим доступа: <https://znanium.com/catalog/document?id=4324661>.
2. Орлова А.М. Органическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. М. Орлова; А.М. Орлова. - Москва : Московский государственный строительный университет, Ай Пи Эр Медиа, ЭБС АСВ, 2016. - 230 с. – Электронный ресурс. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/48034.html>
3. Бёккер Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс] : учебник / Ю. Бёккер. — Электрон. текстовые данные. — М. : Техносфера, 2009. — 528 с. — 978-5-94836-220-5. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/12735.html>

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

№п.п	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел I Аннотация.	Измены часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. год	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
3.	Раздел IV Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации	Разработаны фонды оценочных средств по каждой компетенции	Протокол №1 от 31.08.22г. заседания ученого совета химико-технологического факультета