Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по учебной работе, качеству образования – первый проректор
_____Хагуров Т.А.
«02» июня 2026 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.02.01 СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Специальность	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Направленность (профиль)	Органическая и медицинская химия
Форма обучения	очная
Квалификация	химик

Краснодар 2026

Рабочая программа дисциплины «СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Программу составил(и):
В.В. Доценко, зав. каф., д-р хим. наук

Рабочая программа дисциплины «Спектральные методы исследования органических соединений» утверждена на заседании кафедры органической химии и технологий
протокол № 10 « 28 » апреля 2026г
Заведующий кафедрой д-р хим. наук, Доценко В.В.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий
протокол № 7 «29» апреля 2026г
Председатель УМК ФХиВТ канд. хим. наук Беспалов А.В.

Рецензенты:

Строганова Т.А.., канд. хим. наук, доцент кафедры биотехнологии и продуктов питания животного происхождения ФГБОУ ВО « Кубанский государственный технологический университет»

Буков Н.Н. , д-р хим. наук, профессор кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии КубГУ

1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля)

1.1 Цель освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Спектральные методы исследования органических соединений» состоит в получении студентами теоретических знаний и практических навыков в области современных и классических методов определения состава и строения химических веществ различных классов. Особое внимание в ходе изучения дисциплины уделяется таким методам идентификации как ИК-, ЯМР- и хромато-масс-спектрометрия.

1.2 Задачи дисциплины

Задачи учебной дисциплины «Спектральные методы исследования органических соединений» состоят в получении профессиональных знаний и умений в области структурного анализа сложных органических веществ, а также формировании у студентов профессиональных навыков, позволяющих использовать современные спектральные методы для проведения научных исследований.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Спектральные методы исследования органических соединений» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 "Дисциплины (модули)" учебного плана и является дисциплиной по выбору. В соответствии с рабочим учебным планом дисциплина изучается на 3 курсе. Вид промежуточной аттестации: зачет.

Изучению дисциплины «Спектральные методы исследования органических соединений» предшествует изучение дисциплин «Аналитическая химия» и «Органическая химия».

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций:

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
ПК-2. Способен применять современную аппаратуру при проведении научных исследований, а также обрабатывать и анализировать полученные результаты	
ИПК-2.1. Осуществляет исследование химических соединений и материалов с использованием современного химического оборудования	умеет самостоятельно производить исследования структуры органических соединений при помощи спектральных методов исследования
ИПК-2.2. Обрабатывает и анализирует экспериментальные данные, полученные с использованием современной химической аппаратуры	умеет самостоятельно проводить расшифровку и анализ экспериментальных данных, полученных при помощи спектральных методов исследования
ПК-3. Способен использовать современные теоретические представления химической науки для анализа экспериментальных данных	
ИПК-3.1. Использует современные теоретические представления химической науки в своей профессиональной деятельности	знает основные спектральные методы исследования состава и строения химических соединений; особенности их применения в структурном анализе
ИПК-3.2. Интерпретирует результаты химического эксперимента на основе современных теоретических представлений	владеет навыками применения спектральных методов исследования строения и состава органических соединений

Результаты обучения по дисциплине достигаются в рамках осуществления всех видов контактной и самостоятельной работы обучающихся в соответствии с утвержденным учебным планом.

Индикаторы достижения компетенций считаются сформированными при достижении соответствующих им результатов обучения.

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы (144 часа), их распределение по видам работ представлено в таблице

Виды работ		Всего часов	Форма обучения
			очная
			5 семестр (часы)
Контактная работа, в том числе:			
Аудиторные занятия (всего):		**68**	**68**
занятия лекционного типа		34	34
лабораторные занятия		34	34
практические занятия		-	-
семинарские занятия		-	-
Иная контактная работа:			
Контроль самостоятельной работы (КСР)		2	2
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2
Самостоятельная работа, в том числе:		**73,8**	**73,8**
Оформление лабораторных работ		23,8	23,8
Самостоятельное решение задач		10	10
Самостоятельное изучение теоретического материала		20	20
Подготовка к текущему контролю		20	20
Контроль:			
Общая трудоемкость	**час.**	**144**	**144**
	в том числе контактная работа	**70,2**	**70,2**
	зач. ед	**4**	**4**

2.2 Содержание дисциплины

Распределение видов учебной работы и их трудоемкости по разделам дисциплины.

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 5 семестре (очная форма обучения)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1.	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	17,8	4	-	-	13,8
2.	Электронная УФ спектроскопия	33	8	-	10	15
3.	Колебательная ИК спектроскопия	31	8	-	8	15
4.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	31	8	-	8	15
5.	Масс-спектрометрия. Хромато-масс-спектрометрия	29	6	-	8	15
	ИТОГО по разделам дисциплины	-	34	-	34	73,8
	Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	-	-	-	-
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2	-	-	-	-
	Общая трудоемкость по дисциплине	144	-	-	-	-

Примечание: Л – лекции, ПЗ – практические занятия / семинары, ЛР – лабораторные занятия, СРС – самостоятельная работа студента

2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	Наименование раздела (темы)	Содержание раздела (темы)	Форма текущего контроля

1.	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	Физические принципы спектральных методов исследования. Виды спектров. Связь спектральных методов с частотным диапазоном электромагнитного излучения. Дифракционные и оптические методы.	устный опрос, решение задач
2.	Общая характеристика спектроскопических методов исследования	Особенности взаимодействия излучения с веществом. Характеристическое время различных спектроскопических методов. Применение спектральных методов для структурного анализа органических соединений.	устный опрос, защита лабораторных работ, решение задач
3.	Электронная УФ спектроскопия	Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.	устный опрос, защита лабораторных работ, решение задач
4.	Электронная УФ спектроскопия	Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул.	устный опрос, защита лабораторных работ
5.	Электронная УФ спектроскопия	Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп. Правила Вудворда-Физера. Принцип работы УФ спектрофотометра.	защита лабораторных работ, решение задач
6.	Электронная УФ спектроскопия	Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.	устный опрос, решение задач
7.	Колебательная ИК спектроскопия	Физические основы колебательной спектроскопии. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул.	устный опрос, решение задач
8.	Колебательная ИК спектроскопия	Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений. Структурные области ИК спектра.	устный опрос, решение задач
9.	Колебательная ИК спектроскопия	Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.	устный опрос, решение задач
10.	Колебательная ИК спектроскопия	Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру.	устный опрос, решение задач
11.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Физические основы метода ядерного магнитного резонанса. Тонкая и сверхтонкая структуры сигналов ядер. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса, приемы упрощения сложных спектров.	устный опрос, решение задач
12.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H}. Двойной резонанс.	устный опрос, решение задач
13.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия JC–H, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов.	устный опрос, решение задач
14.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C.	устный опрос, решение задач
15.	Масс-спектрометрия	Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория	устный опрос, решение задач

		устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила.	
16.	Масс-спектрометрия	Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.	устный опрос, решение задач
17.	Масс-спектрометрия	Особенности метода хромато-масс-спектрометрии. Сочетание газового хроматографа с масс-спектрометрическим детектором. Установление количества соединения в образце по площади хроматографического пика.	устный опрос, решение задач

2.3.2 Занятия семинарского типа (практические / семинарские занятия/ лабораторные работы)

№	Наименование раздела (темы)	Тематика занятий/работ	Форма текущего контроля
1.	Электронная УФ спектроскопия	Регистрация УФ спектров органических красителей и комплексных соединений переходных металлов с органическими лигандами. Определение наличия сопряженных фрагментов в структуре органических соединений по УФ спектрам.	ЛР1
2.	Электронная УФ спектроскопия	Исследование влияния растворителя на величину и интенсивность максимума полосы поглощения. Расчет максимума полосы поглощения с использованием правил Вудворда-Физера.	ЛР2
3.	Электронная УФ спектроскопия	Количественный анализ методом УФ-спектроскопии и фотоколориметрии.	ЛР3
4.	Колебательная ИК спектроскопия	Пробоподготовка и регистрация ИК спектров. Определение наличия функциональных групп в структуре органических соединений по ИК спектрам.	ЛР4
5.	Колебательная ИК спектроскопия	Определение структуры органических веществ по данным УФ и ИК спектрометрии. Решение задач.	решение задач
6.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Расчет химических сдвигов по инкрементам. Расшифровка ПМР спектров первого порядка. Расшифровка спектров ПМР высшего порядка.	решение задач
7.	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	Совместное использование спектров ПМР и ЯМР ^{13}C для идентификации органических соединений. Использование компьютерных программ, моделирующих ЯМР спектры.	решение задач
8.	Масс-спектрометрия	Установление брутто-формулы соединения, исходя из интенсивностей пиков изотопных ионов. Установление по масс-спектру структурной формулы соединения. Фрагментация органических соединений. Анализ нефтепродуктов методом хромато-масс-спектрометрии.	решение задач
9.	Масс-спектрометрия	Определение структуры соединения по данным элементного анализа, масс-спектрам, ИК спектрам и спектрам ЯМР (экспериментальные задачи).	решение задач

Защита лабораторной работы (ЛР), контрольная работа (КР).

2.3.3 Примерная тематика курсовых работ

Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы

1	Оформление лабораторных работ	Синтез органических соединений : учебно-методическое пособие / В. В. Доценко, А. В. Беспалов, Д. Ю. Лукина ; Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Кубанский государственный университет. - Краснодар: Кубанский государственный университет, 2020. - 171 с.: ил. - Библиогр.: с. 170. - ISBN 978-5-8209-1758-5: 80 р. - Текст: непосредственный.
2	Самостоятельное изучение теоретического материала	Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. - 89 с.
3	Подготовка к текущему контролю	Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. - 89 с.

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

– в печатной форме увеличенным шрифтом,

– в форме электронного документа,

– в форме аудиофайла,

– в печатной форме на языке Брайля.

Для лиц с нарушениями слуха:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа,

– в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины (модуля)

В ходе изучения дисциплины предусмотрено использование следующих образовательных технологий: лекции, лабораторные занятия, практические занятия, самостоятельная работа студентов.

Компетентностный подход в рамках преподавания дисциплины реализуется в использовании интерактивных технологий и активных методов (проблемная лекция, работа в малых группах) в сочетании с внеаудиторной работой.

Информационные технологии, применяемые при изучении дисциплины: использование информационных ресурсов, доступных в информационно-телекоммуникационной сети Интернет.

Адаптивные образовательные технологии, применяемые при изучении дисциплины – для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «*Спектральные методы исследования органических соединений*».

Оценочные средства включает контрольные материалы для проведения **текущего контроля** в форме задач для решения в аудитории, тестовых работ и контрольных вопросов к лабораторным работам, и **промежуточной аттестации** в форме вопросов для подготовки к зачету.

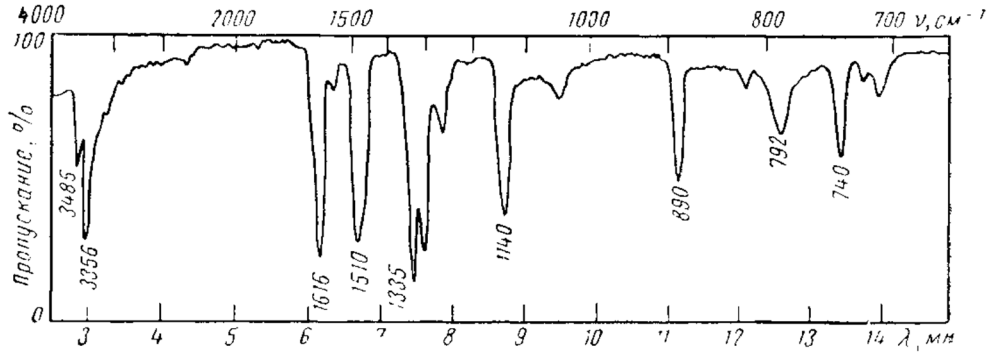
Структура оценочных средств для текущей и промежуточной аттестации

№ п/п	Код и наименование индикатора (в соответствии с п. 1.4)	Результаты обучения (в соответствии с п. 1.4)	Наименование оценочного средства	
			Текущий контроль	Промежуточная аттестация
1	ИПК-2.1. Осуществляет исследование химических соединений и материалов с использованием современного химического оборудования	умеет самостоятельно производить исследования структуры органических соединений при помощи спектральных методов исследования	Лабораторная работа	-
2	ИПК-2.2. Обрабатывает и анализирует экспериментальные данные, полученные с использованием современной химической аппаратуры	умеет самостоятельно проводить расшифровку и анализ экспериментальных данных, полученных при помощи спектральных методов исследования	Лабораторная работа	-
3	ИПК-3.1. Использует современные теоретические представления химической науки в своей профессиональной деятельности	знает основные спектральные методы исследования состава и строения химических соединений; особенности их применения в структурном анализе	Задачи для решения в аудитории, устный опрос	Вопросы на зачете
4	ИПК-3.2. Интерпретирует результаты химического эксперимента на основе современных теоретических представлений	владеет навыками применения спектральных методов исследования строения и состава органических соединений	Задачи для решения в аудитории, устный опрос	Вопросы на зачете

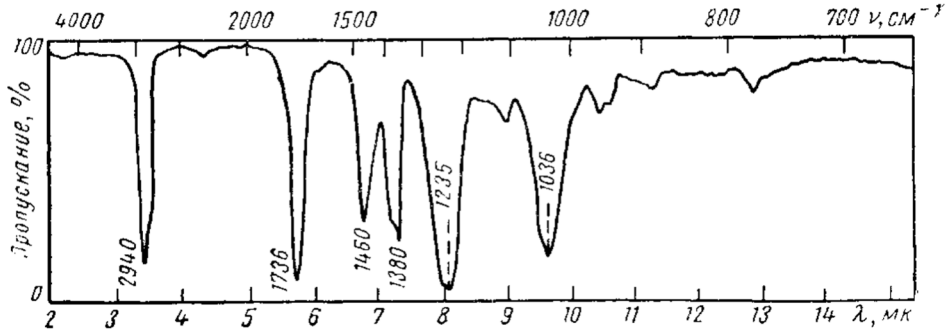
Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Задания для коллективного решения в аудитории

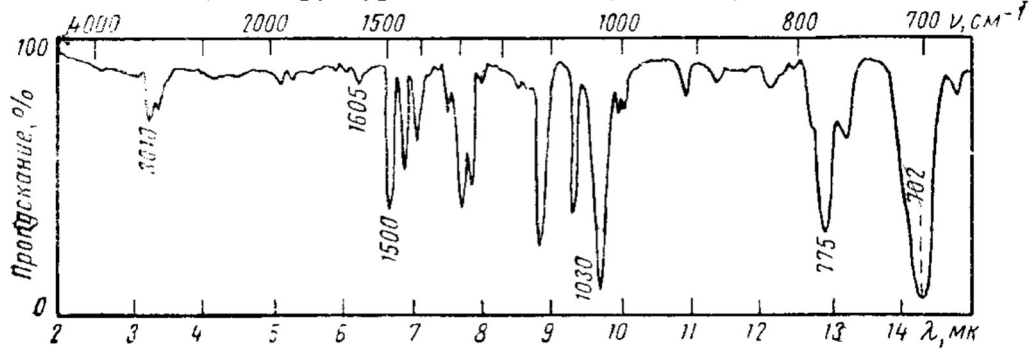
1. Соединение с брутто-формулой $C_6H_4Cl_2N_2O_2$ имеет спектр, приведенный на рисунке (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.



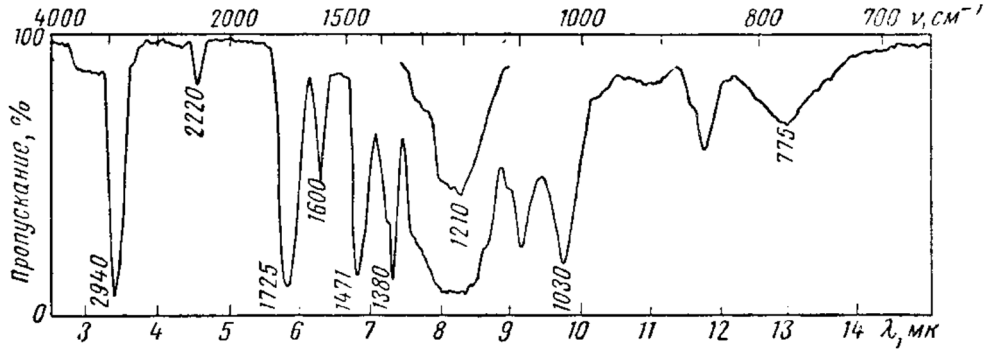
2. В какие функциональные группы входят атомы кислорода в соединении с брутто-формулой $C_8H_{16}O_2$ (спектр жидкой пленки)?



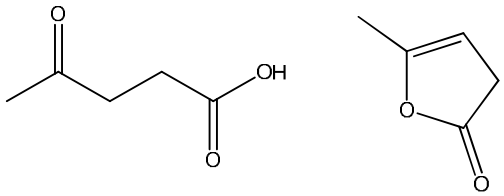
3. Проведите сопоставление полос поглощения в ИК спектре, приведенном на рисунке (в пластинке KBr), со структурой соединения $(C_6H_5CH_2)_2SO$.



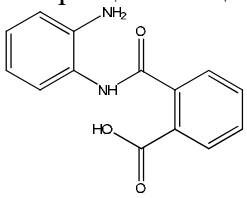
4. По ИК спектру (жидкая пленка) и брутто-формуле $C_9H_{13}O_2N$ определите структурные элементы соединения.



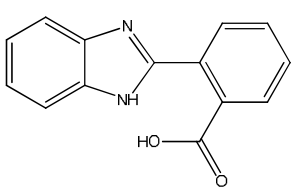
5. В какой форме - открытой или лактонной - существует левулиновая кислота, если в ИК-спектре найдены полосы 3260, 2970, 2870, 2850, 1720, 1705, 900 $см^{-1}$?

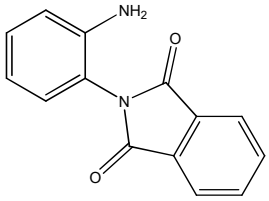


6. При циклизации амида следующей структуры:

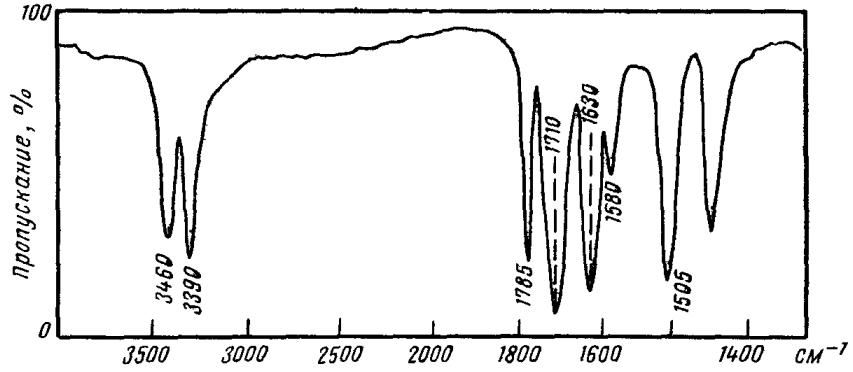


возможно образование двух продуктов реакции:





На рисунке приведен спектр полученного вещества. Какой продукт образовался?

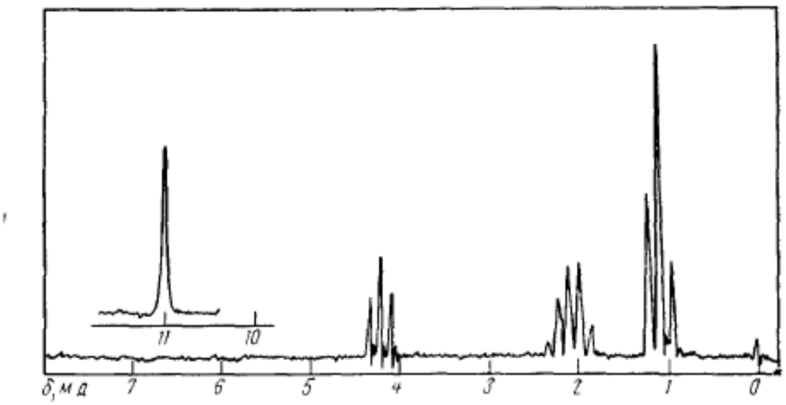


7. Углеводород C_6H_{12} имеет в ИК-спектре полосы поглощения при 3045 и 1650 $см^{-1}$. При озонолизе образуются альдегид и кетон с одинаковым числом атомов углерода в молекуле. Написать структурную формулу углеводорода C_6H_{12}, а также уравнения реакций озонолиза.

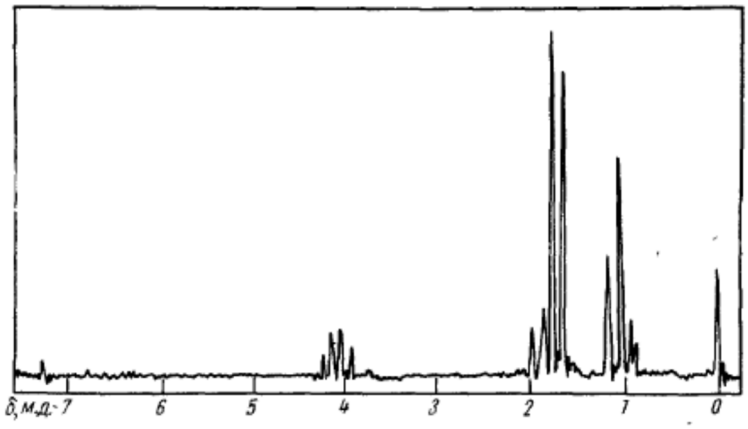
8. В спектре о-нитротолуола имеются полосы поглощения при 2960, 2870, 1520, 1465, 1380, 1330, 850 и 750 $см^{-1}$. После проведения реакции в спектре исчезают полосы при 1520, 1330, 850 и 750 $см^{-1}$ и появляются новые полосы при 3420, 3340, 1644 $см^{-1}$ и широкая полоса при 680 $см^{-1}$. Какая реакция была проведена и с помощью каких реагентов ее можно осуществить?

В результате другой реакции в спектре исчезают полосы при 2960, 2870, 1465, 1380 $см^{-1}$ и появляется широкая полоса в области 2700-2600 $см^{-1}$, а также интенсивная полоса при 1680 $см^{-1}$. Какая реакция проведена в данном случае и с помощью каких реагентов?

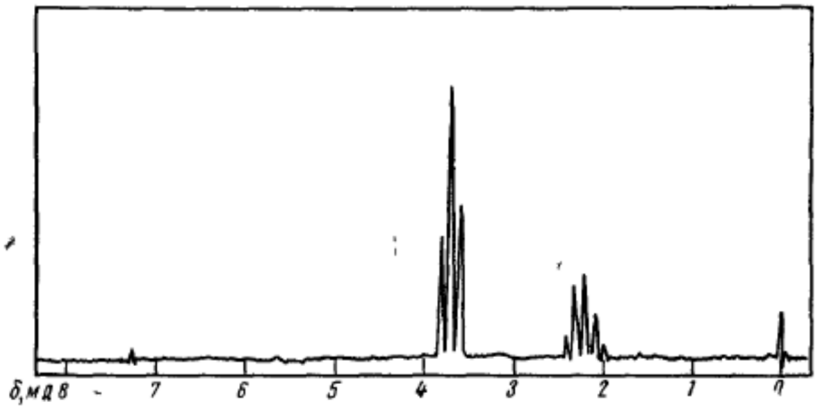
9. На рисунке приведен ПМР спектр одного из изомеров кислоты $C_3H_8BrCOOH$. Какой это изомер?



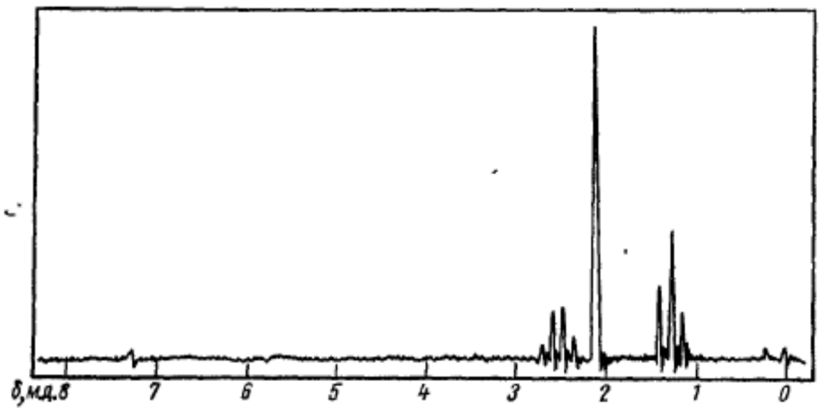
10. Какому из изомеров бромистого бутила принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



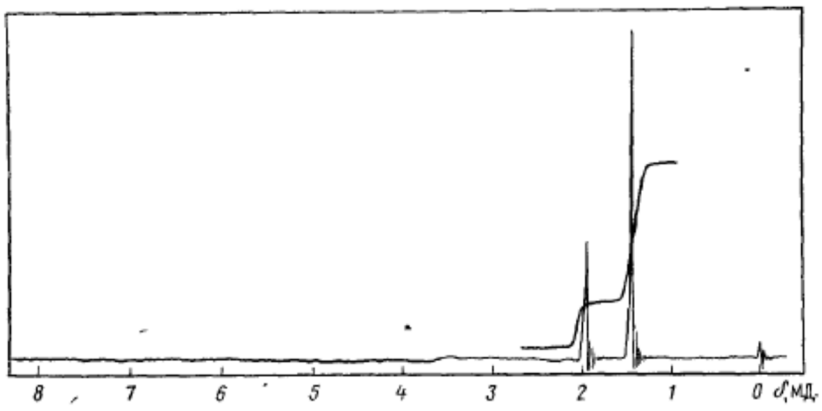
11. Какому из изомеров дихлорпропана принадлежит спектр ПМР, приведенный на рисунке?



12. Какое строение имеет соединение с брутто-формулой C_3H_8S, ПМР спектр которого приведен на рисунке?



13. Спектр соединения $C_6H_{12}O_2$ приведен на рисунке. Определите строение этого соединения.



14. При гидролизе кеталя $C_{10}H_{16}O_4$ (содержащего в спектре ПМР два сигнала) в кислой среде образуется кетон $C_6H_8O_2$ (синглет при 2,4 м.д.) и спирт $C_2H_6O_2$ (два синглета при 3,65 и 4,65 м.д., причем последний соответствует HDO, образующегося в результате дейтерообмена гидроксильной группы спирта в растворе D_2O). Напишите уравнение реакции.

15. После обработки циклопентадиена (два сигнала при 2,9 и 6,4 м.д.) суспензией натрия в абсолютированном ТГФ образуется соединение, дающее лишь один сигнал в спектре ПМР (5,57 м.д.). Объясните происходящее явление.

16. В спектре аквакомплекса $V(H_2O)_6^{3+}$ при 565 нм наблюдается полоса d→d перехода. Рассчитайте энергию расщепления d-орбиталей иона V^{3+} в октаэдрическом поле лигандов: а) в Дж и эВ; б) в Дж·моль$^{-1}$ и кал·моль$^{-1}$.

17. По официальному определению 11 Генеральной конференции по мерам и весам 1 метр равен 1650763,73 длин волн излучения, соответствующего переходу между уровнями $2p_{10}$ и $5d_5$ изотопа ^{86}Kr в вакууме. Рассчитайте для этого перехода: а) λ (Å, нм, мкм); б) ν (Гц); в) $\underline{\nu}$ (см$^{-1}$).

Контрольные вопросы к лабораторным работам

Лабораторная работа №1

1. Какой интервал длин волн отвечает оптическому диапазону?

2. Объясните происхождение спектров испускания (эмиссионных) и поглощения (абсорбционных) атомов и молекул с позиций квантовой теории.

3. Дайте объяснения следующим терминам: стационарные состояния, энергетические уровни, основное (нормальное) состояние, возбужденное состояние, поглощение, испускание, фотон, длина волны, частота, волновое число, спектральная линия, интенсивность спектральной линии, заселенность энергетических уровней, спектр поглощения, спектр испускания.

4. Какие типы переходов в молекуле вызываются поглощением а) ультрафиолетового; б) видимого; в) инфракрасного излучения?

Лабораторная работа №2

1. Изобразите схематически расположение энергетических уровней, соответствующих σ-, π- и n-молекулярным орбиталям, и укажите возможные типы электронных переходов между ними.

2. Почему спектр поглощения имеет вид полос, а не отдельных линий?

3. Чем характеризуется высота и форма максимума в спектре поглощения? От каких факторов зависят эти величины?

4. Какое влияние оказывает растворитель на электронный спектр молекулы? Что называют батохромным и гипсохромным сдвигом?

Лабораторная работа №3

1. В чем сущность колориметрического, фотометрического и спектрофотометрического методов анализа?

2. Приведите уравнение, связывающие коэффициент пропускания Т и оптическую плотность А.

3. Какие факторы влияют на молярный коэффициент поглощения (е).

4. Какова сущность закона Бугера-Ламберта-Бера?

5. Как проводится выбор оптимальных условий фотометрических определений: а) длина волны; б) толщина светопоглощающего слоя (кюветы); в) концентрации.

6. Объясните сущность методов определения концентрации анализируемого вещества: 1) градуировочного графика; 2) метода добавок.

7. В каком случае в фотометрическом анализе используется свойство аддитивности оптической плотности?

8. Назовите фотометрические приборы, предназначенные для работы в: а) видимом; б) ультрафиолетовом; в) инфракрасном участке спектра.

Лабораторная работа №4

1. Назовите основные типы молекулярных колебаний.

2. В каком спектральном интервале в качестве источника света используют лампу накаливания, водородную лампу, штифт Нернста, силитовый глобар, ртутную лампу?

3. Для каких областей спектра предназначены приборы, оптические детали которых выполнены из: а) стекла; б) кварца; в) поваренной соли; г) флюорита?

4. Перечислите основные особенности анализа вещества по ИК-спектрам.

5. В чем сущность количественного анализа в ИК-спектроскопии по методу базовой линии?

Зачетно-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации (зачет)

1. Список вопросов для подготовки к зачету

1. Физические принципы спектральных методов исследования. Виды спектров.

2. Связь спектральных методов с частотным диапазоном электромагнитного излучения. Дифракционные и оптические методы.

3. Особенности взаимодействия излучения с веществом. Характеристическое время различных спектроскопических методов.

4. Применение спектральных методов для структурного анализа органических соединений.

5. Физические основы метода УФ-спектроскопии: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.

6. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул.

7. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп. Правила Вудворда-Физера.

8. Принцип работы УФ спектрофотометра. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

9. Физические основы колебательной спектроскопии. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул.

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

11. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения в ИК спектрах.

12. Последовательность проведения структурного анализа колебательных спектров. Количественная ИК спектроскопия.

13. Принцип работы ИК спектрофотометра. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру.

14. Физические основы метода ядерного магнитного резонанса. Тонкая и сверхтонкая структуры сигналов ядер.

15. Принцип работы ЯМР спектрометра.

16. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса, приемы упрощения сложных спектров.

17. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H}. Двойной резонанс.

18. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов.

19. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы).

20. Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C.

21. Физические основы метода масс-спектроскопии: принцип работы масс-спектрометра, образование масс-спектра, типы регистрируемых ионов.

22. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру.

23. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации.

24. Масс-спектрометрические правила. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Термические реакции в масс-спектрометре.

25. Установление строения органических соединений. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

26. Особенности метода хромато-масс-спектрометрии. Сочетание газового хроматографа с масс-спектрометрическим детектором. Установление количества соединения в образце по площади хроматографического пика.

Критерии оценивания результатов обучения

Оценка	Критерии оценивания
Высокий уровень «5» (зачтено)	Студент свободно владеет теоретическим материалом (система знаний в области спектральных методов исследования химических соединений полностью сформирована), при ответе на вопросы преподавателя практически не допускает каких-либо неточностей или ошибок.
Средний уровень «4» (зачтено)	Студент хорошо владеет теоретическим материалом, имеет сформированную систему знаний в области спектральных методов исследования химических соединений, однако при ответе на вопросы преподавателя допускает незначительное число ошибок, не носящих принципиального характера.
Пороговый уровень «3» (зачтено)	Студент знает основные спектральные методы исследования химических соединений, однако плохо разбирается в деталях изучаемого материала. В ответах на вопросы присутствует значительное число ошибок или неточностей.
Минимальный уровень «2» (не зачтено)	Система в области спектральных методов исследования химических соединений не сформирована, отвечая на вопросы преподавателя студент демонстрирует поверхностные и отрывочные знания курса, либо полное их отсутствие.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

– в печатной форме увеличенным шрифтом,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

– в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

5. Перечень учебной литературы, информационных ресурсов и технологий

5.1. Учебная литература

1. Спектральные методы анализа органических соединений : учебно-методическое пособие / авт.-сост. Е. В. Иванова, Ю. Н. Власова, Н. В. Хлытин, М. Б. Никишина [и др.]. –

Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2018. – 104 с. : табл., ил. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=498983.

2. Спектральные методы анализа лекарственных препаратов : учебно-методическое пособие / сост. Е. В. Иванова, Ю. Н. Власова, Н. В. Хлытин, М. Б. Никишина [и др.]. – Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2018. – 94 с. : ил., табл. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=498982.

3. Устынюк, Ю. А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса / Ю. А. Устынюк. – Москва : Техносфера, 2016. – Часть 1. Вводный курс. – 292 с. : ил., табл., схем. – (Мир химии). – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=444862.

4. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений [Текст] = Spectrometric identification of organic compounds: [учебное пособие] / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с.

5.2. Периодическая литература

1. Оптика и спектроскопия – российский научный журнал, в котором публикуются оригинальные и обзорные статьи из различных областей современной оптики и спектроскопии в диапазоне от радиоволн до рентгеновских лучей. Тематика журнала охватывает проблемы теоретической и экспериментальной спектроскопии атомов, молекул и конденсированного состояния, физики и техники лазеров, взаимодействия лазерного излучения с веществом, нанооптики, оптики фемтосекундных и предельно коротких оптических импульсов, нелинейной и квантовой оптики, физической и геометрической оптики, голографии и физических принципов построения оптических приборов, волоконной оптики, фотоники и оптоинформационных технологий, математического моделирования оптических явлений.

2. Журнал структурной химии – журнал физико-химического профиля, адресованный специалистам, работающим в области квантовой химии, физических методов исследования, кристаллохимии, строения жидкостей, а также широкому кругу химиков. Своеобразие журнала заключается в том, что для исследования электронного и пространственного строения химических соединений в публикуемых работах широко применяются современные физические методы, оригинальные теоретические и экспериментальные подходы.

5.3. Интернет-ресурсы, в том числе современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Электронно-библиотечные системы (ЭБС):

1. ЭБС «ЮРАЙТ» https://urait.ru/
2. ЭБС «УНИВЕРСИТЕТСКАЯ БИБЛИОТЕКА ОНЛАЙН» www.biblioclub.ru
3. ЭБС «BOOK.ru» https://www.book.ru
4. ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com
5. ЭБС «ЛАНЬ» https://e.lanbook.com

Профессиональные базы данных:

1. Web of Science (WoS) http://webofscience.com/
2. Scopus http://www.scopus.com/
3. ScienceDirect www.sciencedirect.com
4. Журналы издательства Wiley https://onlinelibrary.wiley.com/
5. Научная электронная библиотека (НЭБ) http://www.elibrary.ru/
6. Полнотекстовые архивы ведущих западных научных журналов на Российской платформе научных журналов НЭИКОН http://archive.neicon.ru

7. Национальная электронная библиотека (доступ к Электронной библиотеке диссертаций Российской государственной библиотеки (РГБ) https://rusneb.ru/
8. Электронная коллекция Оксфордского Российского Фонда https://ebookcentral.proquest.com/lib/kubanstate/home.action
9. Springer Journals https://link.springer.com/
10. Nature Journals https://www.nature.com/siteindex/index.html
11. Springer Nature Protocols and Methods https://experiments.springernature.com/sources/springer-protocols
12. Springer Materials http://materials.springer.com/
13. Springer eBooks: https://link.springer.com/

Ресурсы свободного доступа:

1. Американская патентная база данных http://www.uspto.gov/patft/
2. Полные тексты канадских диссертаций http://www.nlc-bnc.ca/thesescanada/
3. КиберЛенинка (http://cyberleninka.ru/);
4. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" http://window.edu.ru/;
5. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов http://school-collection.edu.ru/ .

Собственные электронные образовательные и информационные ресурсы КубГУ:

1. Среда модульного динамического обучения http://moodle.kubsu.ru
2. База учебных планов, учебно-методических комплексов, публикаций и конференций http://mschool.kubsu.ru/
3. Библиотека информационных ресурсов кафедры информационных образовательных технологий http://mschool.kubsu.ru;
4. Электронный архив документов КубГУ http://docspace.kubsu.ru/

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Успешное изучение дисциплины «Спектральные методы исследования органических соединений» требует от студентов регулярного посещения лекций, а также активной работы на практических занятиях, выполнения тестовых проверочных работ, выполнения и защиты лабораторных работ, ознакомления с основной и дополнительной рекомендуемой литературой.

При подготовке к лекционному занятию студентам рекомендуется:

1) просмотреть записи предыдущей лекции и восстановить в памяти ранее изученный материал;

2) бегло просмотреть материал предстоящей лекции, с целью лучшего усвоения нового материала;

3) самостоятельно проработать отдельные фрагменты темы прошлой лекции, если это необходимо.

При конспектировании лекционного материала студентам нужно стремиться кратко, схематично, последовательно и логично фиксировать основные положения, выводы, обобщения и формулировки, не пытаясь записать весь преподаваемый материал слово в слово.

При подготовке к лабораторному занятию рекомендуется:

1) внимательно изучить материал предстоящей работы и составить план ее выполнения;

2) уделить повышенное внимание экспериментальным особенностям предстоящей работы (используемым реактивам и оборудованию, а также технике работы с ними);

Выполнять лабораторную работу необходимо аккуратно и последовательно, отражая все ее основные этапы в лабораторном журнале. Для успешной защиты лабораторной работы необходимо тщательно изучить лекционный и, если это необходимо, дополнительный теоретический материал по теме работы, а также правильно заполнить лабораторный журнал, сделав все необходимые расчеты и сформулировав выводы по проделанной работе.

При подготовке к практическому занятию рекомендуется:

1) ознакомиться с темой и планом занятия, чтобы выяснить круг вопросов, которые будут обсуждаться на занятии;

2) поработать с конспектом лекции по теме занятия, а также ознакомиться с рекомендуемой литературой и (при необходимости) дополнительными источниками информации в виде периодических изданий и Интернет-ресурсов.

При выполнении практической работы студентам необходимо отмечать те вопросы и разделы, которые вызывают у них затруднения. с целью последующей консультации у преподавателя. Каждый студент должен стремиться активно работать на практических занятиях и успешно выполнять тестовые проверочные работы.

Самостоятельная работа наряду с аудиторной представляет одну из важнейших форм учебного процесса. Самостоятельная работа — это планируемая работа студентов, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа предназначена не только для овладения представленной дисциплиной, но и для формирования навыков работы вообще, в учебной, научной, профессиональной деятельности, способности принимать на себя ответственность, самостоятельно решать возникающие проблемы, находить правильные решения и т.д.

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

7. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

Наименование специальных помещений	Оснащенность специальных помещений	Перечень лицензионного программного обеспечения
Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: экран, проектор, компьютер	Microsoft Windows; Microsoft Office
Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: экран, проектор, компьютер	Microsoft Windows; Microsoft Office
Учебные аудитории для проведения лабораторных работ. Лаборатория органической химии (ауд. 414С)	Мебель: учебная мебель Технические средства обучения: переносное мультимедийное оборудование (ноутбук, проектор) Оборудование: специализированная лабораторная мебель (столы, стулья, шкафы для реактивов и оборудования, вытяжные шкафы), средства пожарной безопасности и оказания первой медицинской помощи, химическая посуда и	Microsoft Windows; Microsoft Office

Лаборатория спектральных методов исследования (ауд. 405С)	оборудование, весы лабораторные электронные A&D EK-410i, электроплитки – 10 шт., сушильный шкаф, мешалки механические – 8 шт., мешалки магнитные IKA HS 7 – 8 шт., ротационные испарители – 2 шт., рефрактометр ИРФ-454 Б2М, сахариметр СУ-2; приборы для определения температуры плавления ПТП – 8 шт., химические реактивы. Оборудование: специализированная лабораторная мебель, средства пожарной безопасности и оказания первой медицинской помощи, ИК спектрометр ИнфраСпек, оснащённый приставками МНПВО и диффузного отражения – 1 шт., УФ спектрофотометр Leki SS 2109UV -1 шт., фотоколориметр КФК-3-01 – 1 шт. персональный компьютер -2 шт.	Microsoft Windows; Microsoft Office; Инфраспек; Leki ScanPro; Spectragryph (freeware)
Учебные аудитории для курсового проектирования (выполнения курсовых работ)	Курсовая работа не предусмотрена учебным планом.	

Для самостоятельной работы обучающихся предусмотрены помещения, укомплектованные специализированной мебелью, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета.

Наименование помещений для самостоятельной работы обучающихся	Оснащенность помещений для самостоятельной работы обучающихся	Перечень лицензионного программного обеспечения
Помещение для самостоятельной работы обучающихся (читальный зал Научной библиотеки)	Мебель: учебная мебель Комплект специализированной мебели: компьютерные столы Оборудование: компьютерная техника с подключением к информационно-коммуникационной сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду образовательной организации, веб-камеры, коммуникационное оборудование, обеспечивающее доступ к сети интернет (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi)	Microsoft Windows; Microsoft Office
Помещение для самостоятельной работы обучающихся (ауд. 401С)	Мебель: учебная мебель Комплект специализированной мебели: компьютерные столы Оборудование: компьютерная техника с подключением к информационно-коммуникационной сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду образовательной организации, веб-камеры, коммуникационное оборудование, обеспечивающее доступ к сети интернет (проводное соединение и беспроводное соединение по технологии Wi-Fi)	Microsoft Windows; Microsoft Office; Spectragryph (freeware)