



Факультет	Естественных наук	
Кафедра	Химии	
Направление подготовки	44.04.01 Педагогическое образование	
Направленность (профиль)	Образование в области органической химии	
Методы молекулярной спектроскопии в органической химии		Б1.В.04

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого»  
ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л.Н. Толстого»

**УТВЕРЖДЕНА**  
на заседании  
Ученого совета университета  
протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Методы молекулярной спектроскопии в органической химии»**

**Трудоемкость: 3 зачетных единиц**

**Квалификация выпускника: Магистр**

**Форма обучения: очная**

**Год начала подготовки: 2016, 2017**

Заведующий кафедрой химии  Ю.М. Атрошенко

Декан ФЕН



И.В. Шахельдян

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры .....	4
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных	4
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	6
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине .....	6
6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.....	7
6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания .....	7
6.3. 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 .....	8
6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	14
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	15
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	16
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	17
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем .....	18
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	19
12. Аннотация рабочей программы дисциплины .....	20
13. Лист регистрации изменений к рабочей программе дисциплины .....	21
Разработчик: .....	22

## 1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотнесенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

Планируемые результаты освоения образовательной программы (код и название компетенции)	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования компетенции в процессе освоения образовательной программы
ОК-3 способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов профессиональной деятельности	<p><b>выпускник знает:</b> теоретические основы современных спектральных методов анализа</p> <p><b>умеет:</b> оценивать достоинства и ограничения различных методов молекулярной спектроскопии</p>	<p>в соответствии с учебным планом и планируемым и результатами освоения ОПОП</p>
ПК-5 способность анализировать результаты научных исследований, применять их при решении конкретных научно-исследовательских задач в сфере науки и образования, самостоятельно осуществлять научное исследование	<p><b>Выпускник знает:</b> методологию научного эксперимента с использованием методов молекулярной спектроскопии</p> <p><b>Умеет:</b> применять различные методы молекулярной спектроскопии для установления структуры, строения и свойств органических веществ</p>	<p>в соответствии с учебным планом и планируемым и результатами освоения ОПОП</p>
ДПК-3 владеет теорией и навыками практической работы в избранной области органической химии	<p><b>умеет:</b> интерпретировать данные спектральных исследований</p> <p><b>владеет и (или) имеет опыт деятельности:</b> навыками работы на спектральных приборах, приемами статистической обработки спектральных данных</p>	<p>в соответствии с учебным планом и планируемы ми результатами освоения ОПОП</p>

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП МАГИСТРАТУРЫ

Дисциплина «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии» является обязательной дисциплиной вариативной части Блока 1 учебного плана. Изучение данной дисциплины базируется на знаниях студентами Органической химии, Физической химии, Аналитической химии, Биологической химии и Токсикологической химии, Физико-химических методов анализа.

Освоение данной дисциплины необходимо для формирования готовности студента к осуществлению педагогической, научно-исследовательской деятельности, прохождения производственной практики.

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем зачетных единиц / часов по формам обучения
<b>Максимальная учебная нагрузка (всего)</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего)</b>	<b>44</b>
в том числе:	
лекции с применением мультимедийных технологий и раздаточным материалом для студентов	8
лабораторные занятия	36
контроль самостоятельной работы	
<b>Самостоятельная работа студента (всего)</b>	<b>64</b>
в том числе:	
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к лекциям	10
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к лабораторным занятиям	38
выполнение заданий для самостоятельной работы в модульной объектно-ориентированной динамической учебной среде Moodle	10
Подготовка к зачету	6
<i>Промежуточная аттестация в форме зачета</i>	

## 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ

Наименование тем (разделов).	Количество академических или астрономических часов по видам учебных занятий

Методы молекулярной спектроскопии в органической химии		Б1.В.04		
	Занятия лекционного типа	Лабораторные занятия	Другие виды учебных занятий	Самостоятельная работа обучающихся
Тема 1. Общая характеристика методов молекулярной спектроскопии, их классификация	1			2
Тема 2. Электронная спектроскопия органических веществ	1	2		2
Тема 3. Примеры структурного анализа органических веществ по спектру поглощения в ближней области УФ спектра		2		8
Тема 4. Колебательная спектроскопия органических веществ	2	4		4
Тема 5. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических веществ		4		10
Тема 6. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения	2	4		2
Тема 7. Параметры спектров ЯМР	2	4		2
Тема 8. Химические сдвиги ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ в органических соединениях		4		10
Тема 9. Примеры структурного анализа органических веществ с использованием спектроскопии $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ ЯМР		12		18
<b>Зачет</b>				6
<b>ИТОГО 108 часов</b>	<b>8</b>	<b>36</b>		<b>64</b>

**Тема 1. Общая характеристика методов молекулярной спектроскопии, их классификация.**

Области электромагнитного спектра. Возникновение молекулярных спектров. Спектры поглощения. Классификация методов молекулярной спектроскопии.

**Тема 2. Электронная спектроскопия органических веществ.**

Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры молекул органических веществ: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров.

**Тема 3. Примеры структурного анализа органических веществ по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.**

Электронные спектры основных классов органических веществ.

**Тема 4. Колебательная спектроскопия органических веществ**

Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Представления о технике эксперимента и методах приготовления проб в ИК-спектроскопии.

**Тема 5. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических веществ.**

Колебательные спектры основных классов органических веществ.

**Тема 6. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения.**

Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле. Населенности энергетических уровней. Макроскопическое намагничивание. Основные принципы эксперимента ЯМР. СВ-спектрометр. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента. Релаксация. Фазовая когерентность. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР.

**Тема 7. Параметры спектров ЯМР.**

Определение химического сдвига. Спин-спиновое взаимодействие. Интенсивности сигналов в спектрах ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ . Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Примеры магнитно-анизотропных эффектов. Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей. Изотопные эффекты.

**Тема 8. Химические сдвиги ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  в органических соединениях.**

Химические сдвиги  $^1\text{H}$  некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп. Химические сдвиги  $^{13}\text{C}$  некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты.

**Тема 9. Примеры структурного анализа органических веществ с использованием спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$** 

Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы. Некоторые примеры диастереотопии.

**5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Самостоятельная работа обучающихся включает работу с лекционным материалом, поиск и анализ литературы, электронных источников по учебным проблемам дисциплины, работу с электронной образовательной средой MOODLe, подготовку к лабораторным занятиям, выполнение индивидуальных заданий, подготовку к промежуточной аттестации.

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы студентов по дисциплине представлены в модульной объектно-ориентированной динамической среде Moodle.

Для самостоятельной проработки материала в течение семестра студентам рекомендуется ряд учебно-методических пособий, представленных в пункте 7.

**6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ****6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы**

Реализация дисциплины «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии» направлена на формирование следующих компетенций:

- способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов профессиональной деятельности (ОК-3);

- способность анализировать результаты научных исследований, применять их при решении конкретных научно-исследовательских задач в сфере науки и образования, самостоятельно осуществлять научное исследование (ПК-5);
- владеет теорией и навыками практической работы в избранной области органической химии (ДПК-3).

Формирование компетенций ОК-3, ПК-5, ДПК-3 происходит в несколько этапов в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП, соотнесенными с планируемыми результатами обучения по каждой дисциплине и практике.

## 6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов профессиональной деятельности (ОК-3)		
Знания	теоретических основ современных спектральных методов анализа	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения практических занятий, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий
Умения	оценивать достоинства и ограничения различных методов молекулярной спектроскопии	
способность анализировать результаты научных исследований, применять их при решении конкретных научно-исследовательских задач в сфере науки и образования, самостоятельно осуществлять научное исследование (ПК-5)		
Знания	методологии научного эксперимента с использованием методов молекулярной спектроскопии	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения практических занятий, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий
Умения	применять различные методы молекулярной спектроскопии для установления структуры, строения и свойств органических веществ	
владеет теорией и навыками практической работы в избранной области органической химии (ДПК-3)		
Умения	интерпретировать данные спектральных исследований	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения практических занятий, тестирования,
Навыки	работы на спектральных приборах, приемами статистической обработки спектральных данных	

	проверки самостоятельных творческих заданий
--	---

Критерии оценивания сформированности компетенций разработаны на основе балльно-рейтинговой системы с помощью всего комплекса методических материалов, определяющих процедуры оценивания знаний, умений, навыков, характеризующих данный этап формирования компетенций (пункты 6.3, 6.4).

Отметка «зачтено» выставляется, если в процессе освоения дисциплины и сдачи зачета сумма баллов БРС находится в диапазоне значений 61–100. При этом студент на зачете дает полный и правильный ответ, изложение материала произведено в логической последовательности, в самостоятельном (без наводящих вопросов) ответе обстоятельно раскрывает теоретические положения дисциплины, приводит аргументированные примеры, раскрывает пути реализации теоретических положений. В ответе могут быть допущены неточности.

Отметка «не зачтено» выставляется, если в процессе освоения дисциплины студент получил 0–40 баллов. При этом студент на зачете показывает незнание или непонимание большей или наиболее значимой части содержания учебного материала по основным и дополнительным вопросам преподавателя, допускаются существенные ошибки, которые студент не может исправить с помощью наводящих вопросов преподавателя, студент допускает грубое нарушение логики изложения.

### **6.3. 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**

#### **Типовые вопросы для самостоятельной проработки:**

1. Применение УФ спектроскопии для идентификации сильнодействующих и наркотических веществ и их прекурсоров.
2. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
3. Возможности ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье.
4. Применение ИК и КР спектроскопии для идентификации сильнодействующих и наркотических веществ и их прекурсоров.
5. Применение молекулярной спектроскопии в биологии и медицине.
6. Обзор технических характеристик ИК и УФ спектрофотометров ведущих производителей современного аналитического оборудования.
7. История открытия ядерного магнитного резонанса.
8. Применение ЯМР спектроскопии для идентификации наркотических и сильнодействующих веществ.
9. Применение ЯМР спектроскопии для анализа природных объектов.
10. Использование спектроскопии ЯМР в структурном анализе сложных биологических объектов.
11. Возможности применения ЯМР спектроскопии в криминалистике.
12. Обзор технических характеристик ЯМР спектрометров ведущих мировых производителей аналитического оборудования.

#### **Типовые контрольные задания:**

1. Почему пропан имеет длину поглощения 140, а циклопропан 190 нм?
2. Чем вызван сдвиг и небольшое увеличение интенсивности полос поглощения у следующих соединений:
  - а) метан 125 нм, хлорметан 173, нм,
  - б) метан 125 нм, метиловый спирт 183 нм,
  - в) метан 125 нм, метиламин 213 нм,
  - г) этан 135 нм, триэтиламин 227 нм,



- д) метан 135 нм, диметилсульфид 229 нм,  
е) метан 125 нм, бромметан 204 нм,  
ж) метан 125 нм, иодистый метил 258 нм.

Нарисуйте спектры этих соединений на одном рисунке и укажите причины смещения полос поглощения.

3. Охарактеризуйте УФ спектр непредельного соединения. От чего зависит диапазон полос поглощения этих соединений?

4. Укажите причины появления УФ спектра алкенов, диенов, полиенов.

5. Как изменяются параметры УФ спектра для соединений типа  $\text{CH}_3(\text{CH}=\text{CH})_n\text{CH}_3$ ?

6. К каким изменениям в УФ спектре приводит накопление  $\text{C}=\text{C}$  связей, появление электронодонорных заместителей, замена двойной связи на тройную, появление галогена в цепи? В чем причина таких изменений?

7. Используя справочные данные, зарисуйте спектры следующих соединений: этилена, дихлорэтилена, метилэтилена, диметилэтилена, бутадиена-1,3. Обоснуйте наблюдаемый bathochromic сдвиг.

8. Используя справочные данные, зарисуйте спектры следующих соединений: этилена, трихлорэтилена, бутилэтилена, декатетраена-2,4,6,8.

9. Используя справочные данные, зарисуйте спектры следующих соединений: ацетилен, алкилацетилен, диалкилацетилен, бутадиена.

10. Как изменится положение полос поглощения в УФ-спектре п-нитрофенола при замене изооктана на этанол?

11. Идентифицируйте соединение по масс-спектру электронного удара (масс-спектр прилагается)

12. На рисунке представлен масс-спектр электронного удара органического соединения. Установите, какому из перечисленных соединений принадлежит этот спектр: 1) бензойная кислота; 2) о-этилфенол; 3) о-метокситолуол; 4) п-этилфенол; 5) фенилэтиловый эфир; 6) п-толилметилэфир; 7) 2-фенилэтиловый спирт; 8) 1-фенилэтиловый спирт; 9) 2,4-диметилфенол; 10) 2,6-диметилфенол (масс-спектр прилагается)

13. Определите структуру вещества  $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$  по данным масс-спектра ( $m/z$ ): 60 (82), 45 (100), 43 (95), 42 (12), 29 (95), 27 (10), 15 (20).

14. По ИК-спектру определите структуру соединения  $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_3$ , т.пл.  $50^\circ\text{C}$ . Соединение образует кристаллическое производное с 2,4-динитрофенилгидрозином (ИК-спектр прилагается).

15. Предложите структурные формулы веществ состава  $\text{C}_8\text{H}_7\text{OCl}$  и их ИК-характеристики.

16. Укажите различия в ИК-спектрах ацетона, ацетоуксусного эфира и ацетофенона.

17. В ИК-спектре цис 1,2-циклопентандиола полоса поглощения OH-группы имеет более низкую частоту, чем полоса поглощения свободной OH-группы; и эта полоса не исчезает даже при сильном разбавлении. Приведите возможные объяснения.

18. В ИК-спектре ацетилацетона наблюдаются следующие полосы поглощения: 1730; 1680; 1640  $\text{cm}^{-1}$ . Сделайте отнесение этих полос, учитывая таутомерию соединения.

19. Какие изменения можно наблюдать в ИК-спектре этанола при проведении реакции этерификации взаимодействием этанола с уксусной кислотой.

20. Укажите особенности ИК-спектров следующих соединений: ацетон, уксусная кислота, этилацетат (ИК-спектры прилагаются).

21. Как с помощью ИК-спектроскопии можно различить соединения в следующих парах: а)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{COCl}$  б)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$  в)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{CHO}$ ?

22. Как с помощью ИК-спектроскопии можно контролировать ход реакции диазотирования анилина

23. Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{cm}^{-1}$ : 3320, 2940, 1600, 1460, 1380, 1210: бензиловый спирт, пропиловый спирт или уксусная кислота?

24. В ПМР-спектре соединения  $C_2H_3Br_3$  имеются следующие сигналы при  $\delta$  4,3 (дублет) и 5,9 (триплет). Установите строение вещества.

25. В ЯМР-спектре соединения, имеющего состав  $C_2H_4Br_2$ , имеется дублет в сильном поле при  $\delta$  2,5 м.д. и квартет в слабом поле при  $\delta$  5,8 м.д. с соотношением площадей 3:1. Какое строение имеет соединений?

26. Напишите структуры соединений  $C_3H_3Cl_5$  (а) и  $C_3H_3Cl_3$  (б), которым соответствуют следующие данные ЯМР: а) триплет при  $\delta$  4,52 м.д. и дублет  $\delta$  6,07 м.д. с соотношением площадей сигнала протона 1:2; б) синглет  $\delta$  2,20 м.д. и дублет  $\delta$  4,02 м.д. с соотношением площадей пиков 3H : 2H.

27. Определите структурную формулу соединения состава  $C_7H_8SH$ , если в спектре ЯМР этого соединения обнаружены сигналы при  $\delta$  7,2; 3,27; 2,30 м.д.

28. Предскажите ЯМР-спектры соединений:  $CH_3C_6H_4-OCH_2CH_3$  и  $C_6H_5CH_2OCH_2CH_3$ .

29. Как различить по ЯМР-спектрам толуол, п-ксилол и мезитилен?

30. 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.

31. 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.

32. 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?

33. Как с помощью ЯМР-спектров различить соединения состава  $C_2H_3Cl_3$ ?

#### Примеры тестовых заданий:

1. Как расшифровывается аббревиатура УФ-спектроскопия?

- 1) спектроскопия ядерного магнитного резонанса;
- 2) инфракрасная спектроскопия;
- 3) масс-спектрометрия;
- 4) ультрафиолетовая спектроскопия.

2. Укажите длины волн, соответствующие спектральной области УФ-спектроскопии

- 1) 760 – 1100 нм;
- 2) 180 – 760 нм;
- 3) 1 – 100 м;
- 4) 10 – 150 мм.

3. Применение спектрофотометрии в УФ и видимой областях спектра основано на \_\_\_\_\_ электромагнитного излучения соединениями, содержащими хромофорные и ауксохромные группировки.

4. Границы ультрафиолетовой области спектра составляют:

- 1) 10-400 нм;
- 2) 400-750 нм;
- 3) 750-2500 нм;
- 4) 2500-5000.

5 Область электромагнитных волн, соответствующая дальней зоне УФ-области, лежит в диапазоне:

- 1) 1-10 нм;
- 2) 10-400 нм;
- 3) 10-200 нм;
- 4) 200-400 нм.

6. Область электромагнитных волн, соответствующая ближней зоне УФ-области, лежит в диапазоне:

- 1) 1-10 нм;
- 2) 10-400 нм;
- 3) 10-200 нм;

4) 200-400 нм.

7. Как расшифровывается аббревиатура ИК-спектроскопия?

- 1) спектроскопия комбинированного рассеяния;
- 2) инфракрасная спектроскопия;
- 3) ультрафиолетовая спектроскопия;
- 4) электромагнитная спектроскопия.

8. Инфракрасные спектры возникают в результате \_\_\_\_\_ движения молекул при поглощении энергии:

- 1) поступательного;
- 2) вращательного;
- 3) колебательного;
- 4) относительного.

9. В каком диапазоне инфракрасной области спектра находятся частоты нормальных колебаний молекул?

- 1)  $1 - 100 \text{ см}^{-1}$ ;
- 2)  $2000 - 500 \text{ см}^{-1}$ ;
- 3)  $4000 - 400 \text{ см}^{-1}$ ;
- 4)  $1000 - 10 \text{ см}^{-1}$ .

10. На какие типы подразделяются нормальные колебания?

- 1) валентные;
- 2) параллельные;
- 3) деформационные;
- 4) угловые.

11. Укажите формы валентных колебаний:

- 1) веерная;
- 2) ножничная;
- 3) симметричная;
- 4) асимметричная.

12. Частота, соответствующая колебанию определенной связи, мало изменяющейся при переходе от одной молекулы к другой, называется \_\_\_\_\_.

13. Под «областью отпечатков пальцев» в ИК-спектроскопии подразумевают диапазон спектра

- 1)  $1500 - 600 \text{ см}^{-1}$ ;
- 2)  $3200 - 1400 \text{ см}^{-1}$ ;
- 3)  $4000 - 400 \text{ см}^{-1}$ ;
- 4)  $200 - 100 \text{ см}^{-1}$ .

14. Укажите длины волн, соответствующие спектральной области ИК-спектроскопии

- 1) 760 – 1100 нм;
- 2) 180 – 760 нм;
- 3) 1 – 100 м;
- 4) 10 – 150 мм.

15. Области применения ИК-спектроскопии:

- 1) анализ состава и структуры органических молекул;
- 2) регистрация различных функциональных групп в молекулах;
- 3) изучение электронной структуры атомов и молекул;
- 4) количественный анализ в неорганической и аналитической химии.

16. Приборы для получения ИК-спектров называются \_\_\_\_\_.

17. Какое вещество используется для приготовления таблеток для записи ИК-спектров?

- 1) хлорид натрия;
- 2) бромид калия;
- 3) сульфат магния;
- 4) гидроксид бария

18. Укажите типичную область колебаний О-Н-группы, см<sup>-1</sup>:

- 1) 1300-900 ;
- 2) 3000-2800;
- 3) 3650-3200;
- 4) 2200-2000.

19. Укажите типичную область колебаний N-H-группы, см<sup>-1</sup>:

- 1) 3500-3300;
- 2) 400-100;
- 3) 3000-26000;
- 4) 1200-800.

20. Укажите типичную область колебаний С-О-группы, см<sup>-1</sup>:

- 1) 1500-1100;
- 2) 3000-2800;
- 3) 3650-3200;
- 4) 1300-1050.

21. Укажите типичную область колебаний С=О-группы, см<sup>-1</sup>:

- 1) 1300-900;
- 2) 1760-1690;
- 3) 650-400;
- 4) 2200-2000.

22. Основоположниками ядерного магнитного резонанса являются:

- 1) М. В. Ломоносов и Д. И. Менделеев;
- 2) Л. Полинг и А. Байер;
- 3) Э. Перселл и Ф. Блох;
- 4) И. Ньютон и Н. Бор.

23. Как расшифровывается аббревиатура ЯМР-спектроскопия?

- 1) спектроскопия ядерного магнитного резонанса;
- 2) инфракрасная спектроскопия;
- 3) масс-спектрометрия;
- 4) электромагнитная спектроскопия.

24. В ЯМР-спектроскопии определяют:

- 1) напряженность поля;
- 2) энергию поля;
- 3) магнитную восприимчивость;
- 4) магнитную индукцию.

25. Вклад в константу экранирования, влияющий на значения химического сдвига, обусловлен:

- 1) парамагнитной составляющей;
- 2) диамагнитной составляющей;
- 3) разницей составляющих;
- 4) суммой составляющих.

26. Структура соединения в ЯМР-спектроскопии устанавливается по следующим основным характеристикам:

- 1) мультиплетностью;
- 2) химическим сдвигом;
- 3) интегральной интенсивностью;
- 4) всеми перечисленными.

27. В ПМР-спектре смеси циклогексана, тетраметилсилана и бензола содержатся три пика при  $\delta = 0$ ; 7,27; и 1,4 м. д. Определите, какой сигнал относится к какому растворителю:

- 1) 0 м. д. - циклогексан; 1,4 м. д. - тетраметилсилан; 7,27 м. д. - бензол;
- 2) 1,4 м. д. - циклогексан; 0 м. д. - тетраметилсилан; 7,27 м. д. - бензол;
- 3) 7,27 м. д. - циклогексан; 0 м. д. - тетраметилсилан; 1,4 м. д. - бензол;
- 4) 7,27 м. д. - циклогексан; 7,27 м. д. - тетраметилсилан; 0 м. д. - бензол.

28. Гомоядерной называется система, образованная:

- 1) только протонами;
- 2) протоном и углеродом;
- 3) протоном и фтором;
- 4) протоном и азотом.

29. На качество спектров оказывает влияние следующее свойство растворителя:

- 1) вязкость;
- 2) показатель преломления;
- 3) сольватационные свойства;
- 4) вязкость, сольватационные свойства.

30. В ПМР-спектре наблюдается система сигналов, относящихся к алифатическому соединению: дублет и квартет. Определите сочетание групп:

- 1)  $-\text{CH}_2 - \text{CH}_2 -$ ;
- 2)  $-\text{CH}=\text{CH}_2$ ;
- 3)  $-\text{CH} - \text{CH}_3$ ;
- 4)  $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ .

31. Химический сдвиг определяется по формуле:

- 1)  $\delta = (\Delta\nu/\nu_0) \cdot 10^6 = (\Delta H/H_0) \cdot 10^6$ ;
- 2)  $\delta = (\Delta\nu/\nu_0)$ ;
- 3)  $\delta = (\Delta H/H_0)$ ;
- 4)  $\delta = (\Delta\nu/\nu_0)/(\Delta H/H_0)$ .

#### Вопросы к зачету

1. Области электромагнитного спектра. Возникновение молекулярных спектров. Спектры поглощения.
2. Классификация методов молекулярной спектроскопии.
3. Электронная спектроскопия органических веществ. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора.
4. Взаимосвязь электронных спектров и структуры молекул органических веществ: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах.
5. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров.
6. Электронные спектры основных классов органических веществ.
7. Колебательная спектроскопия органических веществ. Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул.
8. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.
9. Представления о технике эксперимента и методах приготовления проб в ИК-спектроскопии.
10. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических веществ.
11. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения. Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле. Населенности энергетических уровней. Макроскопическое намагничивание.

12. Основные принципы эксперимента ЯМР. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента. Релаксация. Фазовая когерентность. Фурье-преобразование. Накопление спектра.
13. Параметры спектров ЯМР. Определение химического сдвига.
14. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигнала. Константы ССВ.
15. Интенсивности сигналов в спектрах ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ .
16. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Примеры магнитно-анизотропных эффектов.
17. Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей. Изотопные эффекты.
18. Химические сдвиги  $^1\text{H}$  некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов ОН, SH и NH групп.
19. Химические сдвиги  $^{13}\text{C}$  некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты.
20. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы. Некоторые примеры диастереотопии.

#### **6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

По дисциплине «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии» используется комплекс учебно-методических материалов в электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролирующую функции. В качестве контролирующей функции комплекс используется для текущего и промежуточного контроля успеваемости и полностью обеспечивает возможность самостоятельной работы студента по материалам дисциплины.

Лабораторные занятия, реализуемые в соответствии с тематическим планированием дисциплины (раздел 4), обеспечены методическими рекомендациями, представленными в печатном или электронном виде.

Оценка теоретических знаний, умений и навыков, сформированных в процессе выполнения лабораторных заданий, осуществляется в форме проверки и защиты рефератов.

Результаты оценивания сформированности знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, фиксируются в БРС дисциплины, итоговый показатель заносится в зачетно-экзаменационную ведомость дисциплины.

Корреляция между 100-балльной системой оценивания БРС и отметкой на промежуточной аттестации

БРС	Отметка на промежуточной аттестации
61–100	Зачтено
0–60	Не зачтено

## 7. ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### 7.1. Основная литература

1. Васильев, В.П. Аналитическая химия в 2ч. Ч.2. Физико-химические методы анализа [Текст]. М. Высш.шк., 2005г.-351с.
2. Спектральные методы анализа. Практическое руководство [Электронный ресурс]: учеб. пособие / В.И. Васильева [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2014. — 416 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/50168>.

### 7.2. Дополнительная литература

1. Основы аналитической химии [Текст]: учебник для студентов химического направления и химических специальностей вузов. В 2 томах / ред. Ю. А. Золотов. - 4-е изд., перераб. доп. - М.: Академия . Т.2. - 2010. - 416 с.
2. Слепченко, Г. Б. Инструментальный анализ биологически активных веществ и лекарственных средств [Электронный ресурс] / Слепченко Г. Б., Дерябина В. И., Гиндулина Т. М., и др. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2015. -198с. — Режим доступа: URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=442807>
3. Агишев, А.Ш. Основы квантовой механики и ЯМР-спектроскопии: учебное пособие [Электронный ресурс] / Агишев А.Ш., Шишкина И.П., Агишева М.А. Казань: Издательство КНИТУ, 2013. — 107 с. Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=258680&sr](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=258680&sr)
4. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса, ч. 1. Вводный курс [Электронный ресурс] М.: Техносфера, 2016. — 292 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=444862&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=444862&sr=1)
5. Бельская, Н.П. Ядерный магнитный резонанс. Теория и практика: учебное пособие: В 3 ч., Ч. 2 [Электронный ресурс] / Бельская Н.П., Ельцов О.С. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014. — 125 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=275797&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=275797&sr=1)
6. Хребтова, С.Б. Физические методы исследования вещества: задания для самостоятельной работы студентов. Ч. 1. Спектроскопия ЯМР и ЭПР [Электронный ресурс] / Хребтова С.Б., Телешев А.Т., Ярышев Н.Г. М.: Издательство МПГУ, 2015. — 20 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=472856&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=472856&sr=1)
7. Беккер, Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс]: научная монография / Беккер Ю. Издательство: М.: РИЦ "Техносфера", 2009. — 528 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=88994&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=88994&sr=1)
8. Фарус, О. А., Якушева Г. И. Физические и физико-химические методы анализа: лабораторный практикум [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / Фарус О. А., Якушева Г. И. М., Берлин: Издательство: Директ-Медиа, 2015. — 78 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=375309&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=375309&sr=1)
9. Кириллова Е. А., Маряхина В. С. Методы спектрального анализа: учебное пособие [Электронный ресурс] / Кириллова Е. А., Маряхина В. С. Издательство: Оренбургский государственный университет, 2013. — 108 с. - Режим доступа: URL: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=258856&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=258856&sr=1)

#### *Периодические издания:*

1. Вестник Московского университета. Серия 2: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Химический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Москва. 1986-2014. URL: <http://www.chemnet.ru/rus/vmgu/welcome.html>.
2. Вестник БГУ. Серия 2: Химия. Биология. География [Электронный ресурс]: сайт

/ Белорусский государственный университет. Минск. 1973-2014. URL: <http://www.bsu.by/ru/main.aspx?guid=184121>

3. Вестник Пермского университета. Серия: Химия. [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2011-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=32574>.

4. Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: Физика. Химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1969-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9468>.

5. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет). Челябинск. 2009-2014. URL: <http://www2.susu.ac.ru/ru/science/publish/vestnik>.

6. Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Сибирский федеральный университет. Красноярск. 2008-2014. URL: <http://journal.sfu-kras.ru/home>.

7. Известия Академии наук. Серия химическая [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1961-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7833>.

8. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Физика и химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2001-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=38071>.

9. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2000-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9907>.

#### **8. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

1. Российское образование [Электронный ресурс]: Федеральный портал. Министерство образования и науки РФ. URL: <http://www.edu.ru>.

2. Федеральный государственный образовательный стандарт [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://standart.edu.ru>.

3. Единое окно доступа к образовательным ресурсам [Электронный ресурс]: информационная система / ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика». – М.: [б. и.], 2005. URL: <http://window.edu.ru>.

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: информационный портал / ООО «РУНЭБ», Санкт-Петербургский государственный университет. – М.: [б. и.], 2010. URL: [www.eLibrary.ru](http://www.eLibrary.ru).

5. Российское образование [Электронный ресурс]: федеральный портал / ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика». - М.: [б. и.], 2002. URL: [www.edu.ru](http://www.edu.ru).

6. Руконт [Электронный ресурс]: национальный цифровой ресурс / ООО «Агентство Книга-Сервис». – М.: [б. и.], 2011. URL: <http://www.rucont.ru>.

7. Университетская библиотека Online [Электронный ресурс] / ООО "Директ-Медиа". - М : [б. и.], 2006. URL: [www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru).

8. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://school-collection.edu.ru>.

9. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://fcior.edu.ru>.

10. Российский общеобразовательный портал [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://www.school.edu.ru>.



11. Каталог образовательных ресурсов сети Интернет для школы [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://katalog.iot.ru>.

12. Химия. Первое сентября [Электронный ресурс]: Учебно-методический журнал для учителей химии и естествознания. - М.: Чистые пруды; ИД "Первое сентября". URL: <http://him.1september.ru>.

13. ChemNet Россия [Электронный ресурс]: портал фундаментального химического образования России / МГУ им. М. В. Ломоносова. - М. : [б. и.], 1997. URL: <http://www.chem.msu.su>.

14. Издательство "Просвещение" [Электронный ресурс]: информационный сайт / Изд-во "Просвещение". - М. : [б. и.], 2005-2014. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL: <http://www.prosv.ru>

15. Дрофа-Вентана-Граф: объединённая издательская группа. <https://drofa-ventana.ru>.

## 9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Для успешного изучения дисциплины «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии» предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- курс лекций;
- задания для самостоятельной работы студентов;
- комплект текущих тестовых заданий и контрольных работ в электронном и печатном виде для контроля знаний по предмету на лабораторных занятиях и КСРС.

Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии», который следует получить на сайте университета в сети интернет в модульной объектно-ориентированной динамической учебной среде Moodle и использовать для подготовки к лабораторным занятиям, зачету. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем. С целью успешного освоения лекционного материала, по каждой теме студенты пишут контрольные диктанты

Готовясь к лабораторным занятиям, студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подготовиться к выполнению лабораторной работы, оформить лабораторный журнал по разработанной схеме, выполнить задания для самостоятельной работы.

При изучении дисциплины «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии» студент должен получить представление об основных методах молекулярной спектроскопии, используемых для установления строения органических соединений. Добиться этого позволяет лабораторный практикум. Каждая лабораторная работа должна быть защищена.

## 10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются информационные технологии, охватывающие ресурсы (компьютеры, программное обеспечение и сети), необходимые для управления информацией (создание, хранение, управление, передача и поиск информации):

- технические средства: компьютерная техника и средства связи (ноутбук, проектор, экран, USB-накопители и т.п.);
- коммуникационные средства (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты, личного кабинета студента и преподавателя);
- организационно-методическое обеспечение (электронные учебные и учебно-методические материалы, компьютерное тестирование, использование электронных мультимедийных презентаций при проведении лекционных и лабораторных занятий);
- программное обеспечение (Microsoft Office, Excel, Power Point, Word и т.д.), Skype, поисковые системы, электронная почта и т.п.);
- среда электронного обучения ТГПУ им. Л.Н. Толстого <http://moodle.tsput.ru>.

### комплект лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Программное обеспечение Microsoft Office XP Professional Win32 Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
4. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г.
5. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
6. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 1894-150512-101810 от 12-05-2015 г.

### современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал "Информационно-коммуникационные технологии в образовании" <http://www.ict.edu.ru>.
5. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
6. База спектральных данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония. Режим доступа: [http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)

7. Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
8. Программное обеспечение: ChemOffice со встроенным генератором спектров ЯМР.

### **11. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованные мультимедийными средствами обучения.

2. Учебные аудитории для проведения лабораторных занятий.

3. Компьютерные классы с доступом в интернет для работы с информационно-правовыми системами, в том числе «Гарант» и с доступом к электронно-библиотечной системе.

4. Аудитории для самостоятельной работы студентов, оснащенные компьютерной техникой, имеющей доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронной информационно-образовательной среде ТГПУ им. Л.Н. Толстого, внутривузовскому сетевому окружению.

## 12. АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ.

### 1. Планируемые результаты обучения при освоении дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

- способность к самостоятельному освоению и использованию новых методов профессиональной деятельности (ОК-3);
- способность анализировать результаты научных исследований, применять их при решении конкретных научно-исследовательских задач в сфере науки и образования, самостоятельно осуществлять научное исследование (ПК-5);
- владеет теорией и навыками практической работы в избранной области органической химии (ДПК-3).

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести:

#### знания:

- теоретических основ современных спектральных методов анализа (ОК-3);
- методологии научного эксперимента с использованием методов молекулярной спектроскопии (ПК-5);

#### умения:

- оценивать достоинства и ограничения различных методов молекулярной спектроскопии (ОК-3);
- применять различные методы молекулярной спектроскопии для установления структуры, строения и свойств органических веществ (ПК-5);
- интерпретировать данные спектральных исследований (ДПК-3);

#### навыки:

- работы на спектральных приборах, владения приемами статистической обработки спектральных данных (ДПК-3).

### 2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина «Методы молекулярной спектроскопии в органической химии» является обязательной дисциплиной вариативной части Блока 1 учебного плана. К началу изучения дисциплины студенты должны владеть базовыми педагогическими и химическими знаниями.

3. **Объем дисциплины** 3 зачетные единицы.

4. **Образовательный процесс** осуществляется на русском языке.

5. **Разработчик:** профессор, доктор химических наук, заведующий кафедрой химии Атрощенко Ю.М.

**13. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ  
ДИСЦИПЛИНЫ****2016-2017 учебный год**

В рабочую программу дисциплины внесены изменения в части обновления состава необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 2 от 16 февраля 2017 г.

**2017-2018 учебный год**

**Обновлен состав необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения.**

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.

2. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.

3. Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian - контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.

4. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.

5. Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional - контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.

6. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.

7. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.

8. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 17E0-170518-102844-823-690 от 18-05-2017 г.

**Обновлен состав современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.**

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.

2. Официальный интернет-портал базы данных правовой информации <http://pravo.gov.ru>.

3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.

4. Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» <http://www.ict.edu.ru>.

5. Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных <http://webofscience.com>.

6. Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) <http://neicon.ru>.

7. Базы данных издательства Springer <https://link.springer.com>.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Разработчик:

<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Учёная степень</b>	<b>Учёное звание</b>	<b>Должность</b>
Атрощенко Юрий Михайлович	Доктор химических наук	Профессор	Заведующий кафедрой химии