

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 23.05.2024 09:40:33  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

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

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

**Физико-химические методы исследования структуры органических соединений**

Закреплена за кафедрой:

**Органической химии**

Направление подготовки:

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность (профиль):

**Экспертная и медицинская химия: теория и практика.**

Квалификация:

**Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения:

**очная**

Семестр:

**5,6**

Программу составил(и):

*д-р хим. наук, зав. кафедрой, Ворончихина Людмила Ивановна*

Тверь, 2024

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цели освоения дисциплины (модуля):

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

### Задачи:

Задачами освоения дисциплины являются:

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

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

### Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Физическая химия

Методика научного исследования

Органическая химия

Физика

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

Научно-исследовательская работа

Физические методы исследования

Коллоидная химия

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

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

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

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

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

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

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

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

## 5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	6

зачеты	5
--------	---

## 6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

## 7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

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

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

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

### Список образовательных технологий

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

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Оценочные материалы для проведения текущей аттестации приведены в приложении 2

### 8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации приведены в приложении 2

### 8.3. Требования к рейтинг-контролю

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

### 9.1. Рекомендуемая литература

#### 9.3.1 Перечень программного обеспечения

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

#### 9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	ЭБС «ZNANIUM.COM»
2	ЭБС «ЮРАИТ»

3	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
4	ЭБС IPRbooks
5	ЭБС «Лань»
6	ЭБС BOOK.ru
7	ЭБС ТвГУ
8	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
9	Репозиторий ТвГУ

#### 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

#### 11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические материалы приведены в приложении 1 и 3

### ПРИЛОЖЕНИЕ 1

#### Образовательные технологии:

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

#### ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ И УПРАЖНЕНИЙ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

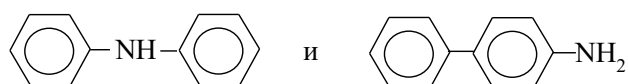
1. В ЯМР-спектре соединения, имеющего состав  $C_2H_4Br$ , имеется дублет в сильном поле 2,5 м.д. и квартет в слабом поле 5,8 м.д. с соотношением площадей 3:1. Какое строение имеет соединений?
2. Напишите структуры соединений  $C_3H_3Cl_5$  (а) и  $C_3H_3Cl_3$  (б), которым соответствуют следующие данные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

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



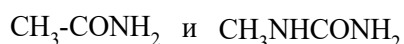
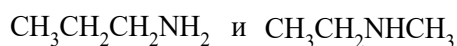
18. В ИК-спектре цис 1,2-циклопентандиола полоса поглощения ОН-группы имеет более низкую частоту, чем полоса поглощения свободной ОН-группы; и эта полоса не исчезает даже при сильном разбавлении. Приведите возможные объяснения.
19. В какие функциональные группы входят атомы кислорода и азота в соединении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

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



Предложите данные ИК-спектров для различия этих структур

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



### КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЗАЧЕТА

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

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

## ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ИТОГОВОГО ЭКЗАМЕНА

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

## ОБРАЗЦЫ ЭКЗАМЕНАЦИОННЫХ БИЛЕТОВ

### Билет №

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

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

### Билет №

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

### Билет №

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

### Требования к рейтинг-контролю (для экзамена)

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

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

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

#### 5.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

#### ТИПОВЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РЕЙТИНГОВОГО КОНТРОЛЯ

##### *5 семестр, I модуль*

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

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

##### Задание №2

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

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

##### Задание №3

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

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

##### Задание №4

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

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



в) нитрил метоксипропионовой кислоты

Задание №5

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

3280, 2940, 1460, 1375, 1355

а) диметилкарбинол

б) *n*-хлорбензойная кислота

в) диметиланилин

Задание №6

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

2940, 2230, 1440, 1380

а) нитрил фенилуксусной кислоты

б) нитрил пропионовой кислоты

в) ацетиленкарбоновая кислота

### ***5 семестр, II модуль***

Задание №7

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

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

а) диметилбензол

б) бензальдегид

в) уксусная кислота

Задание №8

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

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

а) *n*-нитробензальдегид

б) *n*-метилтолуол

в) *m*-хлорбензамид

Задание №9

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

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

а) метоксибензол

б) метилфенилсульфид

в) тиофенол

### Задание №10

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см<sup>-1</sup>:  
3030, 2900, 2550, 805

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

### Задание №11

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

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

### Задание №12

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

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

## **6 семестр, I модуль**

### Задание №1

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

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

### Задание №2

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

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

### Задание №3

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

- а) бензойная кислота
- б) нитробензол
- в)  $\beta$ -хлорэтоксibenзол

### Задание №4

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

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

### Задание №5

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

- а) бензальдегид
- б) бензиловый спирт
- в) ( $\beta$ -гидрокси) этилбензол

### Задание №6

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

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

## ***6 семестр, II модуль***

### Задание №7

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

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

### Задание №8

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

а) ( $\beta$ -гидрокси)этилбензол

б) *n*-этоксibenзол

в) бензиловый спирт

### Задание №9

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

а) бензмеркаптан

б) *n*-метилтиофенол

в) бензальдегид

### Задание №10

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

а) толуол

б) этилбензол

в) 1,2-диметилбензол

### Задание №11

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

а) 1,4-диметилбензол

б) *n*-метилфенол

в) толуол

### Задание №12

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

а) пропан

б) бутиламин

в) нитропропан

## **5.2. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации**

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

(код, наименование компетенции)

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

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

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

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

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

(код, наименование компетенции)

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



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

		Г. Незначительно различающиеся.	
<b>Задания открытого типа</b>			
6	<b>Какой сигнал и в какой области спектра следует ожидать для соединения <math>(\text{CH}_3)_3\text{N}</math>?</b>		3 балла
Правильный ответ (ключ): 1. Определяем класс соединения – амин. 2. Оцениваем количество эквивалентных протонов: 9. 3. Сигнал должен быть в области ~ 2 м.д. (синглет).			1 балл 1 балл 1 балл  Итого: 3 балла
7	<b>Предложите структуру соединения <math>\text{C}_5\text{H}_{12}</math>, которое имеет только один сигнал в ЯМР-спектре.</b>		3 балла
Правильный ответ (ключ): 1. Записываем структурные формулы: $(\text{CH}_3)_4\text{C}$ , $\text{C}_5\text{H}_{12}$ . 2. Определяем число эквивалентных протонов: 12. 3. Устанавливаем структура соединения: $(\text{CH}_3)_4\text{C}$ .			1 балл 1 балл 1 балл  Итого: 3 балла
8	<b>По данным ИК-спектра подтвердите структуру п-нитробензальдегида: 3100; 1708; 1608; 1580; 1536; 1348<math>\text{cm}^{-1}</math>.</b>		3 балла
Правильный ответ (ключ): 1. Определяем класс соединения: ароматический альдегид. 2. Выделяем функциональные группы: $\text{CHO}$ ; $\text{NO}_2$ ; $\text{C}_6\text{H}_4$ . 3. С помощью справочной таблицы определяем положение полос поглощения.			1 балл 1 балл  1 балл  Итого: 3 балла

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

## ПРИЛОЖЕНИЕ 3

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

#### 6.1. Рекомендуемая литература

##### Основная:

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

##### Дополнительная:

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

## ПРИЛОЖЕНИЕ 4

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