

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович

Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности

Дата подписания: 13.07.2026 14:46:38

Уникальный программный ключ:

aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.04.01 Химия

ОХ 2025.plx

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

Утверждаю:

Руководитель ООП

Ворончихина Л.И.

28 мая 2026г.



Рабочая программа дисциплины

Спектроскопия органических соединений

Закреплена за
кафедрой: **Органической химии**

Направление
подготовки: **04.04.01 Химия**

Направленность
(профиль): **Органическая химия**

Квалификация: **Магистр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **2**

Программу составил(и):

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

Тверь, 2026

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Цель данной дисциплины – научить студента-органика устанавливать структуру органических соединений по его спектральным характеристикам

Задачи :

Задачи дисциплины - выбор методов исследования обусловлен как широтой их применения в практике химиков-органиков для установления строения синтезируемых соединений и выяснения их физических и химических свойств, так и оснащённостью соответствующим оборудованием кафедры. В предлагаемом учебно-методическом комплексе в сжатой форме даются основы методы, его применение, практические работы, задачи. Представлены разделы, включающие диагностические материалы, контрольные задачи, задачи для самоподготовки. Примеры подобраны так, чтобы дать возможность будущему специалисту практически использовать этот материал и показать достижения современной химии.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Строение и реакционная способность органических соединений

Механизмы органических реакций

Нанохимия

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

Современные проблемы химии поверхностноактивных веществ

Элементоорганическая химия

Актуальные задачи современной химии. Часть 2.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	6 ЗЕТ
Часов по учебному плану	216
в том числе:	
самостоятельная работа	119
часов на контроль	27

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

ОПК-1.1: Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ОПК-1.2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ОПК-2.1: Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их

ОПК-2.2: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	2
курсовые работы	2

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
	Раздел 1. Введение. Предмет и задачи курса.				
1.1	Спектроскопия как средство исследования органических молекул.	Лек	2	2	
1.2	Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии (ИК, УФ, КР), ядерной спектроскопии (ЯМР, ЯКР), спектроскопии ЭПР и использование их как средств исследования органических соединений.	Ср	2	30	
1.3	Применение ЭВМ для установления строения органических соединений.	Лаб	2	10	
	Раздел 2. Тема 1. Общие сведения о спектрах				
2.1	Характеристика электромагнитного излучения.	Лек	2	2	
2.2	Основные параметры: длина волны, частота, волновое число. Область оптических спектров: ИК-область, видимая и ультрафиолетовая.	Лаб	2	10	
2.3	Законы поглощения света. Объединенный закон Ламберта-Бэра. Способы изображения спектров поглощения	Ср	2	20	
	Раздел 3. Тема 2. Инфракрасная спектроскопия				
3.1	Происхождение спектров. Колебания и спектры двух- и многоатомных молекул. Число полос в спектре. Нормальные колебания.	Лек	2	4	
3.2	Скелетные и групповые частоты (характеристические). Связь колебательных спектров со строением органических соединений. Анализ частот некоторых групп. Экспериментальные данные по классам органических соединений.	Лаб	2	10	

3.3	Общие сведения о спектроскопии комбинационного рассеяния (СКР). Происхождение спектров СКР и необходимость их применения для полной характеристики колебаний молекул.	Ср	2	30	
	Раздел 4. Тема 3. Электронные спектры органических молекул				
4.1	Основные вопросы, решаемые с помощью УФ-спектроскопии. Происхождение электронных спектров. Классификация электронных переходов.	Лек	2	2	
4.2	Терминология и обозначения, применяемые в электронной спектроскопии: батохромный (красный) и гипсохромный (синий) сдвиги, сольватохромные эффекты, хромофоры, ауксохромы. Электронные спектры основных классов органических соединений. Ненасыщенные соединения, карбонильные соединения.	Лаб	2	10	
4.3	Эффекты сопряжения в электронных спектрах: бутадиен, винилологи, полиены $C=C-C=O$. Эмпирические правила вычисления максимумов λ_{max} полос поглощения в сопряженных системах (правило Вудворда).	Ср	2	20	
	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	2	3	
5.2	Внешние и внутренние эталоны. Различные шкалы химических сдвигов и соотношение между ними. Использование химических сдвигов в структурном анализе. Таблицы химических сдвигов. Расчет химических сдвигов протонов по аддитивной схеме.	Лаб	2	5	
5.3	Тонкая структура сигналов ЯМР и ее происхождение. Спин-спиновое взаимодействие. Основные сведения о возможности применения ЯМР ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F и др.	Ср	2	19	
	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	2	2	
	Раздел 7. Контроль				

7.1	Контроль	Экзамен	2	27	
-----	----------	---------	---	----	--

Список образовательных технологий

1	Игровые технологии
2	Проектная технология
3	Технологии развития критического мышления
4	Активное слушание

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

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: $CH_3C_6H_4-OSCH_2CH_3$ и $C_6H_5CH_2OSCH_2CH_3$.

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, п-ксилол и мезитилен.

10. Соединения $CHCl_2-CHCl_2$ ($\square=6,0$ м.д.) и CCl_3-CH_2Cl ($\square=3,9$ 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 $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$?

15. Как с помощью ИК-спектров различить ацетилацетон, диметилсульфоксид и ацетон?

16. Определите структуру соединения $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$, если в спектре присутствуют следующие полосы поглощения: 1680 (с.); 1600 (ср.); 1580 (ср.); 1450 (ср.); 1360 (с.); 1265 (с.); 755 (с.); 690 (с.) см^{-1} .

17. Фенол с диоксаном образует водородную связь. Предскажите, как изменится прочность такой водородной связи при введении в молекулу фенола следующих заместителей: p-CH_3 ; m-Cl ; p-Cl ; p-NO_2 ; $\text{m-CH}_3\text{O}$; $\text{p-CH}_3\text{O}$.

18. 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.

19. В какие функциональные группы входят атомы кислорода и азота в соединении с брутто формулой $\text{C}_7\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_7$, если в ИК-спектре наблюдаются интенсивные полосы при 1590 см^{-1} и 1330 см^{-1} , широкая полоса в области 3500-3360 см^{-1} и полосы при 1125 и 1047 см^{-1} .

20. В ИК-спектре ацетилацетона наблюдаются следующие полосы поглощения: 1730; 1680; 1640 см^{-1} . Сделайте отнесение этих полос, учитывая таутомерию соединения.

21. В ПМР-спектре лаурокса-9 (неионогенное ПАВ общей формулы $\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{COO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n\text{H}$, где $n_{\text{ср}}=9$) обнаружены следующие сигналы, $\square$ м.д.: 0,80; 1,20; 2,15; 3,40; 4,0; 2,85; а в ИК-спектре имеются полосы поглощения, см^{-1} : 3400, 2930, 2860, 1740, 1380, 720, 1355, 1055, 1115. Сделайте отнесение полос и сигналов в спектрах лаурокса-9.

22. В ИК-спектре синтанола ДС-10 (неионогенное ПАВ общей формулы $\text{RO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n\text{H}$, где $n_{\text{ср}}=10$) имеются следующие полосы поглощения, см^{-1} : 3450, 2870, 2935, 1465, 725, 1350, 1050, 1100 и в ПМР-спектре следующие сигналы $\square$ 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 $\text{C}_{12}\text{H}_{23}\text{O}_2\text{Na}$).

24. В ПМР-спектре лауратамоноэтаноламмония (растворитель CCl_4), анионное ПАВ общей формулы $\text{C}_{14}\text{H}_{31}\text{O}_3\text{N}$, имеются следующие сигналы $\square$ м.д.: 0,84; 1,24; 2,0; 2,82; 3,56; 7,6 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 8, 2, 2, 2, 4 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения, см^{-1} : 3300, 3050, 2960, 2930, 2860, 1560, 1425, 1465, 1380, 1180-1350, 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 $\text{C}_8\text{H}_{17}\text{SO}_3\text{Na}$).

26. Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилсульфата натрия (анионное ПАВ общей формулы $\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{SO}_4\text{Na}$).

27. В ПМР-спектре моноцетилфосфата натрия (анионное ПАВ общей формулы $C_{16}H_{33}PO_4Na_2$) имеются следующие сигналы, $\square$ м.д.: 0,80; 1,20; 3,65 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 28, 2 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения, см⁻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, см⁻¹: 3025, 2930, 2860, 1635, 1585, 1505, 1490, 1470, 1380, 780, 685, 720. В ПМР-спектре имеются следующие сигналы протонов, $\square$ м.д.: 0,81; 1,20; 1,85; 4,70; 8,26; 8,71; 9,40 с интегральными интенсивностями 3, 8, 2, 2, 2, 1, 2 соответственно. Сделайте вывод о структуре соединения и предложите отнесение сигналов и полос в молекуле.

29. Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилбензилдиэтиламмоний хлорида (катионное ПАВ общей формулы $C_{21}H_{38}NCl$).

30. Предложите ИК-, УФ- и ЯМР-спектральные данные для N-бензилпиперидиний хлорида (катионное ПАВ общей формулы $C_{23}H_{37}NCl$).

31. В анилине хромофором является не только бензольное кольцо, но и неподеленная электронная пара азота. Оба хромофора сопряжены друг с другом. Образование соли при действии разбавленной серной кислоты изменяет спектр анилина. В УФ-спектре анилина обнаружена поглощение при 286 нм и 234 нм. Сделайте отнесение полос и объясните отличия в положении главных полос соли анилина ($\square=254$ 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:

ПРИМЕРНЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПИСЬМЕНННОГО ОПРОСА

Задание 1.

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

2. Предложите ИК-спектральные характеристики ацетона, анилина и формальдегида.

Задание 2.

1. Как различить по ПМР-спектрам ацетонитрил, метилакрилат и ацетон?

2. К кому типу электронных переходов относятся полосы максимального поглощения 2,6-диметилгептадиен-2,5-опа-4 260 нм ($\square=24000$) и 380 нм ($\square=80$).

Задание 3.

1. Какие соединения можно различить по УФ-спектрам?

2. Какие характеристические частоты можно использовать для контроля за ходом реакции восстановления

Задание 4.

1. Как с помощью ИК-спектроскопии можно контролировать ход реакции диазотирования анилина
2. В спектре ПМР смеси бензола и циклогексана содержатся два сигнала (1,4 и 7,3 м.д.) с соотношением интенсивностей 2:1. Определите количественный состав смеси.

Задание 5.

1. Какие изменения можно наблюдать в ИК-спектре этанола при проведении реакции этерификации взаимодействием этанола с уксусной кислотой.
2. Соединения $\text{CHBr}_2\text{-CHBr}_2$ ($\delta=6$ м.д.) и $\text{CBr}_3\text{-CH}_2\text{Br}$ ($\delta=3,9$ м.д.) дают в спектрах ЯМР синглеты вследствие химической эквивалентности атомов водорода. Объясните различия в химических сдвигах.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ К ЭКЗАМЕНУ

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

17. Дайте определение молярному коэффициенту поглощения.
18. От каких факторов зависит точное положение максимума поглощения?
19. Укажите границы области инфракрасной спектроскопии.
20. Переведите область длин волн от 25 до 2,5 мкм в волновые числа.
21. Почему инфракрасные спектры называют колебательными?
22. Какие колебания называют валентными, деформационными?
23. Какие поглощения называют характеристическими?
24. Какие вопросы решаются с помощью ИК-спектроскопии?
25. Назовите основные области ИК-спектра.
26. Какую область ИК-спектра называют «областью отпечатков пальцев»?
27. Почему в УФ-спектроскопии при снятии спектра необходимо точно указывать молярную концентрацию и толщину слоя исследуемой пробы в отличие от ИК-спектроскопии?
28. В каких единицах выражают концентрацию раствора при снятии УФ-спектров?
29. Как обычно готовят разбавленные растворы для снятия УФ-спектров?
30. Почему при снятии ^{13}C ЯМР-спектров растворы должны быть как можно более концентрированными?
31. Какие растворители используют при снятии ^1H ЯМР-спектров?
32. Как можно снять ИК-спектр твердого вещества?
33. Какие методы подготовки образцов для снятия ИК-спектров вы знаете?
34. Почему необходимо обеспечивать высокую чистоту ампулы и растворителя при снятии ЯМР-спектров?
35. Какие колебания в ИК-области следует относить к валентным, а какие к деформационным?
36. Чем вызвано появление в ИК-спектре большого количества полос деформационных колебаний?
37. При снятии ПМР-спектров можно использовать внутренний или внешний стандарт (эталонное вещество). Назовите эти вещества.
38. Что выражает термин «интегральная интенсивность» в ЯМР-спектроскопии?
39. В каких единицах измеряются смещения резонансных сигналов протонов в ПМР-спектрах?

40. Какие шкалы резонансных сигналов протонов вы знаете?

41. Что выражает собой электронный спектр поглощения вещества?

8.3. Требования к рейтинг-контролю

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

Рекомендуемая литература

Основная

Шифр	Литература
Л.1.1	Тупикин, Химия. В 2 ч. Часть 2. Органическая химия, Москва: Юрайт, 2023, ISBN: 978-5-534-02227-8, URL: https://urait.ru/bcode/513727
Л.1.2	Тупикин, Химия. В 2 ч. Часть 1. Общая и неорганическая химия, Москва: Юрайт, 2023, ISBN: 978-5-534-02226-1, URL: https://urait.ru/bcode/513685

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	http://www.xumuk.ru/ :
----	---

Перечень программного обеспечения

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

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
3-407а	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, весы, холодильник, шкафы, рефрактометр, горелка, мойка, плитки электрические, столы, сушилка

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ