

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тольяттинский государственный университет»

**Б1.В.01**  
(индекс дисциплины)

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

Дополнительные главы аналитической химии и физико-химических методов анализа  
(наименование дисциплины)

по направлению подготовки  
18.04.01 Химическая технология

направленность (профиль)  
Химическая биотехнология

Форма обучения: очная

Год набора: 2022

Общая трудоемкость: 6 ЗЕ

**Распределение часов дисциплины по семестрам**

Семестр	1	Итого
Форма контроля	экзамен	
Вид занятий		
Лекции	32	32
Лабораторные	48	48
Практические		
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,35	0,35
Контактная работа	80,35	80,35
Самостоятельная работа	100	100
Контроль	35,65	35,65
<b>Итого</b>	<b>216</b>	<b>216</b>

Рабочую программу составил(и):

доцент, к.х.н. Григорьева О.Б.

*(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)*

---

Рецензирование рабочей программы дисциплины:

☒

Отсутствует

☐

Рецензент

*(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)*

---

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана направления подготовки (специальности)

18.04.01 Химическая технология

---

**Срок действия программы практики до «31» августа 2024 г.**

УТВЕРЖДЕНО

На заседании Центра медицинской химии

---

(протокол заседания № 2 от «27» августа 2021 г.).

### 1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины – формирование у магистрантов представлений о современных аналитических, в том числе инструментальных, методах контроля качества биотехнологических продуктов, а также их идентификации и установления структуры.

### 2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Системный подход к научно-исследовательской работе», «Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов», «Химическая биотехнология».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Аналитический контроль качества производства», «Инструментальные методы исследований в химической технологии», «Надлежащая лабораторная практика (GLP)», «Производственная практика (НИР) 1, 2, 3, 4», «Преддипломная практика».

### 3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК-3. Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний в области химической биотехнологии, проводить их обработку и анализировать их результаты, изучать свойства химического и биохимического сырья и продуктов, полученных на их основе.	ПК-3.1 Способен осуществлять выбор современных физико-химических методов и выполнять методики эксперимента на их основе для решения широкого ряда исследовательских задач в области химической биотехнологии	Знать: - теоретические основы современных методов анализа; - теоретическую базу, устройство и области применения современных аналитических приборов;
		Уметь: - разрабатывать стратегию и тактику проведения экспериментов и испытаний; - выбирать оптимальный метод анализа
	ПК-3.2 Способен использовать физико-химические методы анализа для изучения качественных и количественных характеристик сырья (сырьевой базы)	Владеть: - методами планирования и оптимизации проведения исследовательских и проектных работ; - современными компьютерными технологиями обработки результатов научных исследований.  Знать: - теоретические основы методов и принципы выполнения измерений, предлагаемые аттестованными методиками; - преимущества и недостатки широко применяемых инструментальных методов анализа;

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
	химического и биотехнологического производства	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- планировать исследования объекта с привлечением разных методов, применимых для решения поставленных задач;</li> <li>- подбирать методы и соответствующее аналитическое оборудование для решения конкретных задач;</li> </ul> <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- навыками работы на аналитических приборах;</li> <li>- навыками по постановке аттестованных методик выполнения измерений;</li> <li>- методиками идентификации и количественного анализа в инструментальных методах анализа</li> </ul>

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
Раздел 1. Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия	Лек 1	Основы метода масс-спектрометрии. Основные термины и определения. Изотопный эффект, его роль в расшифровке масс-спектра	1	2	-	-	
	Лек 2	Аппаратура для масс-спектрометрии. Система ввода, источники ионизации, масс-анализаторы, детекторы	1	2	-	-	
	Лаб 1	Определение путей фрагментации и предсказание масс-спектра органических соединений	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лек 3	Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Практические приемы интерпретации масс-спектров.	1	2	-	-	
	Лек 4	Фрагментные ионы. Направления фрагментации основных классов органических соединений	1	2	-	-	
	Лаб 2	Установление брутто-формулы органических соединений по спектру электронного удара	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лек 5	Фрагментация основных классов органических соединений (продолжение)	1	2	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
	Лек 6	Хромато-масс-спектрометрия	1	2	-	-	
	Лаб 3	Расшифровка масс-спектров некоторых органических соединений. Установление молекулярной формулы и структуры	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лек 7	Тандемная масс-спектрометрия. Фрагментация белков, нуклеиновых кислот, микроорганизмов. Протеомика	1	2	-	-	
	Лек 8	Количественная масс-спектрометрия. Приемы и возможности	1	2	-	-	
	Лаб 4	Хромато-масс-спектрометрическое исследование ароматических соединений	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лаб 5	Хромато-масс-спектрометрия азотсодержащих гетероциклов Контрольная работа	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе Контрольная работа №1
	Лаб 6	Установление последовательности аминокислотных звеньев в пептидах	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
	СР 1	Проработка тем раздела, подготовка к лабораторным работам и экзамену	1	50	-	-	
Раздел 2. Методы ЯМР	Лек 9	Основы метода ЯМР. Спиновое состояние ядер. Гиромагнитная постоянная. Магнитные моменты ядер	1	2	-	-	
	Лек 10	Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-спектрометр. Импульсный метод. Классическое описание импульсного эксперимента. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР.	1	2	-	-	
	Лаб 7	Подготовка образца к ЯМР-исследованию. Подготовка образца к транспортировке на ЯМР-исследование.	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
	Лек 11	Химический сдвиг. Влияние зарядовой плотности на атомах. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Примеры магнитно-анизотропных эффектов. Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля	1	2	-	-	
	Лек 12	Химические сдвиги $^1\text{H}$ некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены.	1	2	-	-	
	Лаб 8	Расшифровка спектров $^1\text{H}$ магнитного резонанса	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лек 13	Химические сдвиги $^1\text{H}$ некоторых органических соединений. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов -OH, -SH и -NH групп	1	2	-	-	
	Лек 14	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины	1	2	-	-	



Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
	Лаб 9	Расшифровка спектров на ядрах $^{13}\text{C}$	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лек 15	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты. Симметрия и эквивалентность. Хиральность, гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы	1	2	-	-	
	Лек 16	Двумерная ЯМР-спектроскопия. 2D спектры белков. COSY, TOCSY, NOESY. Метод последовательного отнесения сигналов. Методы гетероядерной корреляции. Методы 3D спектроскопии белков.	1	2	-	-	
	Лаб 10	Двумерная ЯМР (гомоядерная и гетероядерная)	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лаб 10	Программы для визуализации спектров ЯМР NUTS, WINNMR, ACD Spec_Manager	1	4	-	-	Отчет по лабораторной работе

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного)
	Лаб 10	Контрольная работа по расшифровкам спектров ЯМР	1	4	-	-	Контрольная работа №2
	СР 2	Проработка лекционного материала, тем раздела, подготовка к лабораторной работе, контрольной работе, экзамену	1	50	-	-	
	ПА	Промежуточная аттестация	1	0,35	-	-	
	Контроль	Экзамен	1	35,65	-	-	Вопросы к экзамену
Итого:				216	-		

## 5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины используется технология традиционного обучения – организация учебного процесса в вузе, основанная на лекционно-семинарско-зачетной формах обучения. К формам обучения относятся лекции, практические и лабораторные занятия, а также самостоятельная работа. На лекциях используются наглядные и словесные методы обучения, на практических и лабораторных занятиях – наглядные, словесные и практические методы.

## 6. Методические указания по освоению дисциплины

### Раздел 1

#### Масс-спектрометрия и хромато-масс-спектрометрия

**Темы лекционных занятий:** Основы метода масс-спектрометрии. Основные термины и определения. Изотопный эффект, его роль в расшифровке масс-спектра. Аппаратура для масс-спектрометрии. Система ввода, источники ионизации, масс-анализаторы, детекторы. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Фрагментные ионы. Направления фрагментации основных классов органических соединений. Установление брутто-формулы органических соединений по спектру электронного удара. Хромато-масс-спектрометрия. Тандемная масс-спектрометрия. Фрагментация белков, нуклеиновых кислот, микроорганизмов. Протеомика. Количественная масс-спектрометрия. Приемы и возможности.

**Темы лабораторных занятий:** Определение путей фрагментации и предсказание масс-спектра органических соединений. Установление брутто-формулы органических соединений по спектру электронного удара. Расшифровка масс-спектров некоторых органических соединений. Установление молекулярной формулы и структуры. Хромато-масс-спектрометрическое исследование ароматических соединений. Хромато-масс-спектрометрия азотсодержащих гетероциклов. Установление последовательности аминокислотных звеньев в пептидах.

**Изучив данный раздел, студент должен:** овладеть основами метода масс-спектрометрии и хромато-масс-спектрометрии

**Знать:** теорию масс-спектрометрии, способы и пути фрагментации органических молекул, типы масс-анализаторов и квадруполь

**Уметь:** определять молекулярный ион, расшифровывать молекулярную формулу соединения по молекулярному иону, предсказывать пути фрагментации

**Владеть:** методами расшифровки структуры соединения по фрагментарным ионам, приемами расшифровки последовательности аминокислотного состава в полипептидной цепи

#### Методические рекомендации по изучению темы:

При освоении темы необходимо:

- Ознакомиться с имеющимися литературными источниками (учебниками, монографиями, электронными ресурсами, статьями в ведущих химических журналах), лекциями преподавателей

- Сформировать понимание основ масс-спектрометрии, возможностей метода и приемов обработки результатов масс-спектрометрического и хромато-масс-спектрометрического эксперимента

- Ответить на контрольные вопросы:

1. Что может быть объектом для масс-спектрометрии?

2. Что представляет собой масс-спектрометр?
3. Какое уравнение отражает принцип действия спектрометра? Какие величины являются постоянными?
4. Какую информацию можно получить с помощью масс-спектрометрии?
5. Что такое изотопы? Что такое дефект массы?
6. Какие типы масс-анализаторов Вы знаете?
7. Перечислите способы ионизации для получения ионных пучков.
8. Из каких основных блоков состоят ионные пушки?
9. В чем заключается принцип работы электростатической фокусировки пучков заряженных частиц?
10. Что такое энергия ионизации? Какие типы фрагментации вам известны?
11. Опишите принципиальную схему масс-спектрометра.
12. Каковы закономерности фрагментации молекулярного иона?
13. Что такое перегруппировочные ионы? Какие типы перегруппировок Вы знаете?

## Раздел 2

### Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

**Темы лекционных занятий:** Основы метода ЯМР. Спиновое состояние ядер. Гиромагнитная постоянная. Магнитные моменты ядер. Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-спектрометр. Импульсный метод. Классическое описание импульсного эксперимента. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР. Химический сдвиг. Влияние зарядовой плотности на атомах. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Примеры магнитно-анизотропных эффектов. Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Химические сдвиги  $^1\text{H}$  некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Химические сдвиги  $^1\text{H}$  некоторых органических соединений. 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. Химические сдвиги  $^{13}\text{C}$  некоторых групп органических соединений. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты. Симметрия и эквивалентность. Хиральность, гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы. Двумерная ЯМР-спектроскопия. 2D спектры белков. COSY, TOCSY, NOESY. Метод последовательного отнесения сигналов. Методы гетероядерной корреляции. Методы 3D спектроскопии белков.

**Темы лабораторных занятий:** Подготовка образца к ЯМР-исследованию. Подготовка образца к транспортировке на ЯМР-исследование. Расшифровка спектров  $^1\text{H}$  магнитного резонанса. Расшифровка спектров на ядрах  $^{13}\text{C}$ . Двумерная ЯМР (гомоядерная и гетероядерная). Программы для визуализации спектров ЯМР NUTS, WINNMR, ACD/Spec\_Manager

**Изучив данный модуль, студент должен:** сформировать основные представления о спектроскопии ядерного магнитного резонанса, его возможностях, ограничениях и областях применения.

**Знать:** теоретические основы ЯМР, основные принципы эксперимента ЯМР, современные подходы в 2D и 3D ЯМР-спектрометрии.

**Уметь:** расшифровывать спектры ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ , предсказывать спектр по структурной формуле вещества.

**Владеть:** программами моделирования спектров и программами для визуализации спектров ЯМР.

## Методические рекомендации по изучению темы:

При освоении темы необходимо:

– Ознакомиться с имеющимися литературными источниками (учебниками, монографиями, электронными ресурсами, статьями в ведущих химических журналах), лекциями преподавателей

– Сформировать понимание основ спектроскопии ядерного магнитного резонанса, возможностей и ограничения метода.

– Ответить на контрольные вопросы:

1. На каком явлении основан метод ЯМР-спектроскопии?
2. Какие ядра атомов могут вызывать сигнал в спектрах ЯМР?
3. Что называется резонансной частотой ядра?
4. Что называется временем спин-решеточной релаксации?
5. Что представляет собой спектр ЯМР?
6. Что называется химическим сдвигом сигнала ЯМР? В каких единицах измеряется химический сдвиг?
7. На чем основано явление анизотропии?
8. Чем вызвано расщепление сигнала ЯМР?
9. Что отражает мультиплетность сигнала?
10. Что отражает интенсивность мультиплета?
11. Что отражает константа спин-спинового взаимодействия? От каких факторов она зависит, в каких единицах измеряется?
12. Какие протоны называются магнитно-эквивалентными?
13. Что называется спиновой системой?
14. Какие методы для упрощения сложных спектров Вам известны?
15. Что называется химическим обменом? От каких факторов может зависеть скорость химического обмена? Какое отражение в спектрах ЯМР находит химический обмен?
16. Почему в спектре ЯМР  $^{13}\text{C}$  все сигналы являются синглетами (в молекуле нет других магнитно-активных ядер)?

## 7. Оценочные средства

### 7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	ПК-3	Вопросы к экзамену 1-60
		Отчеты по лабораторным работам
		Контрольные работы

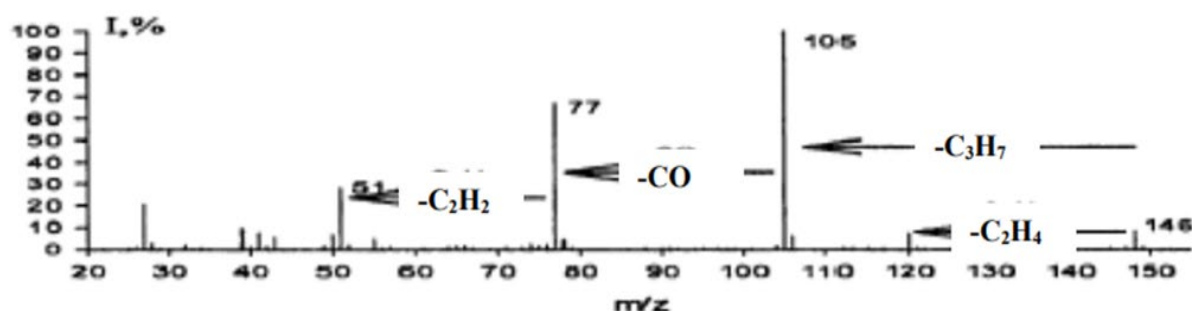
### 7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

#### 7.2.1. Контрольные работы

#### Контрольная работа 1 «Масс-спектрометрия»

Вариант 1.

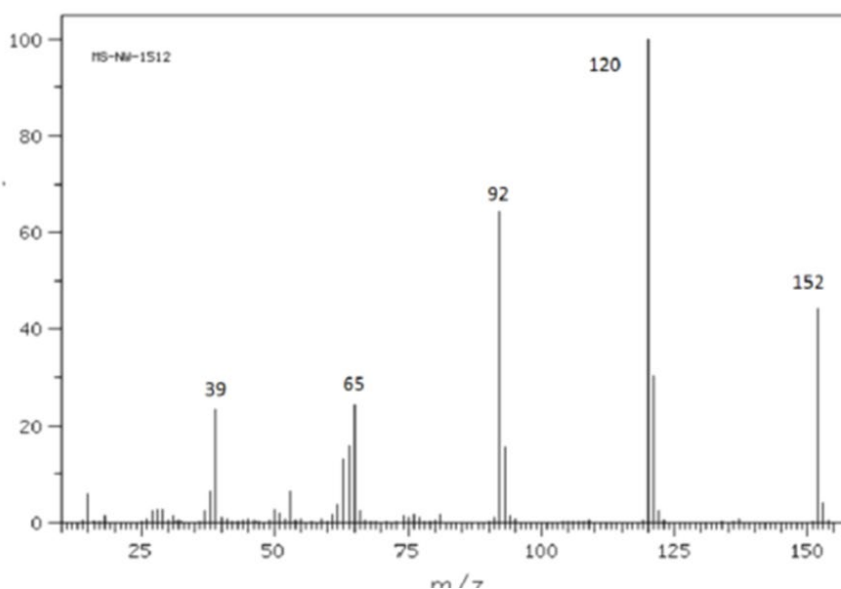
1. Составьте схему фрагментации молекулярного иона бутирофенона по масс-спектру



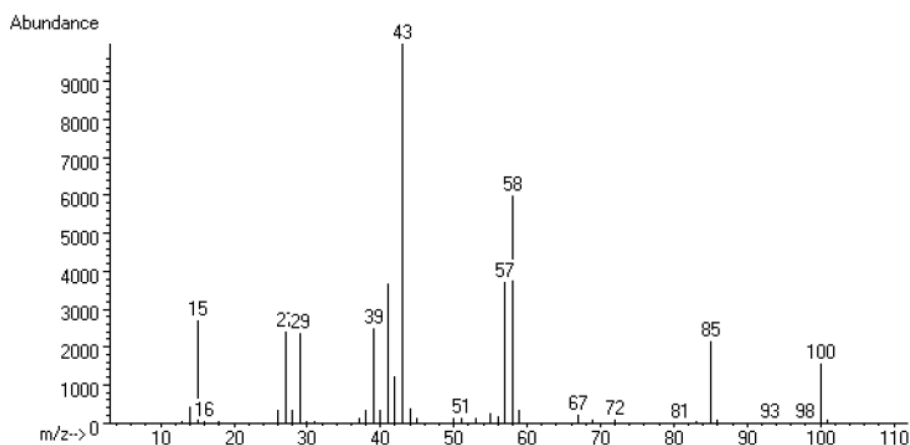
2. Определите элементный состав приведенных соединений по интенсивностям изотопных пиков молекулярного иона:

100 (100%), 101 (7.9%), 102 (0.26%);

3. Интерпретируйте фрагментацию метилсалициата, приводящую к появлению в масс-спектре ЭИ пиков, указанных на рисунке. Составьте схему фрагментации.

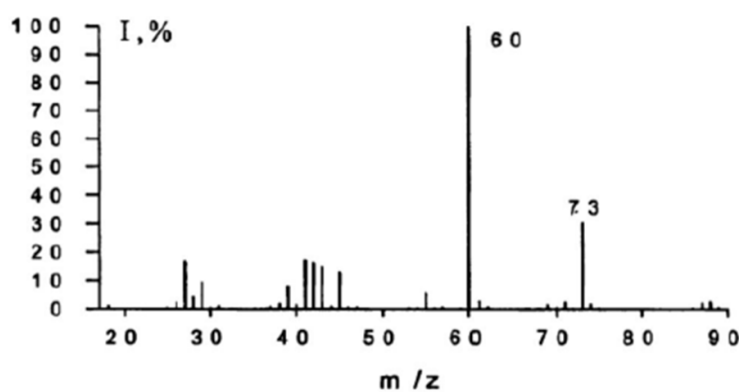


4. Расшифруйте масс-спектр, определите брутто-формулу соединения



$m/z$	I, %	$m/z$	I, %	$m/z$	I, %	$m/z$	I, %	$m/z$	I, %
14	4,70	31	0,80	49	0,30	59	3,80	83	0,80
15	27,12	37	1,60	50	1,40	65	0,30	84	0,30
16	0,70	38	3,60	51	1,50	67	2,50	85	21,92
18	0,60	39	25,22	52	0,40	68	0,30	86	1,27
25	0,30	40	3,80	53	1,70	69	1,20	87	0,10
26	3,50	41	37,03	54	0,40	70	0,20	91	0,10
27	24,22	42	12,41	55	2,90	71	0,40	100	15,71
28	3,60	43	100,0	56	2,10	72	1,20	101	1,10
29	23,92	44	4,20	57	37,53	81	0,20	102	0,10
30	0,80	45	1,60	58	60,17	82	0,20		

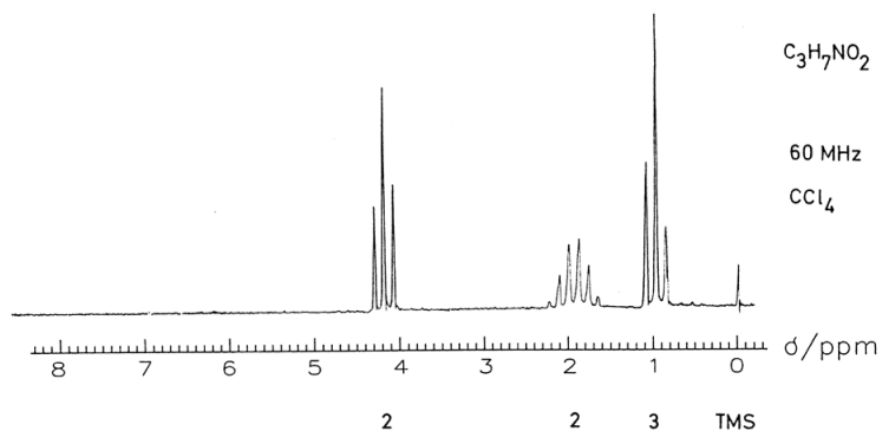
5. Идентифицируйте соединение по масс-спектру ЭИ



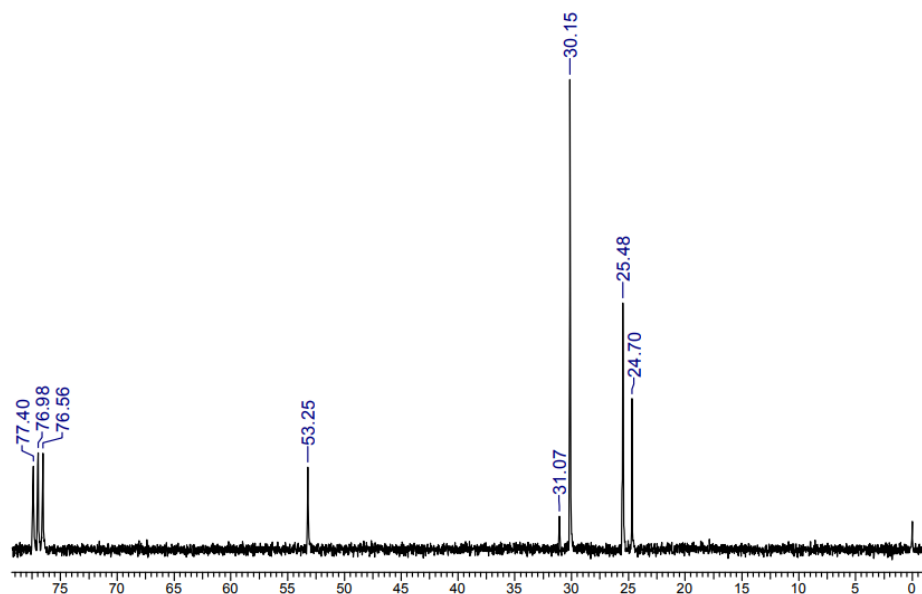
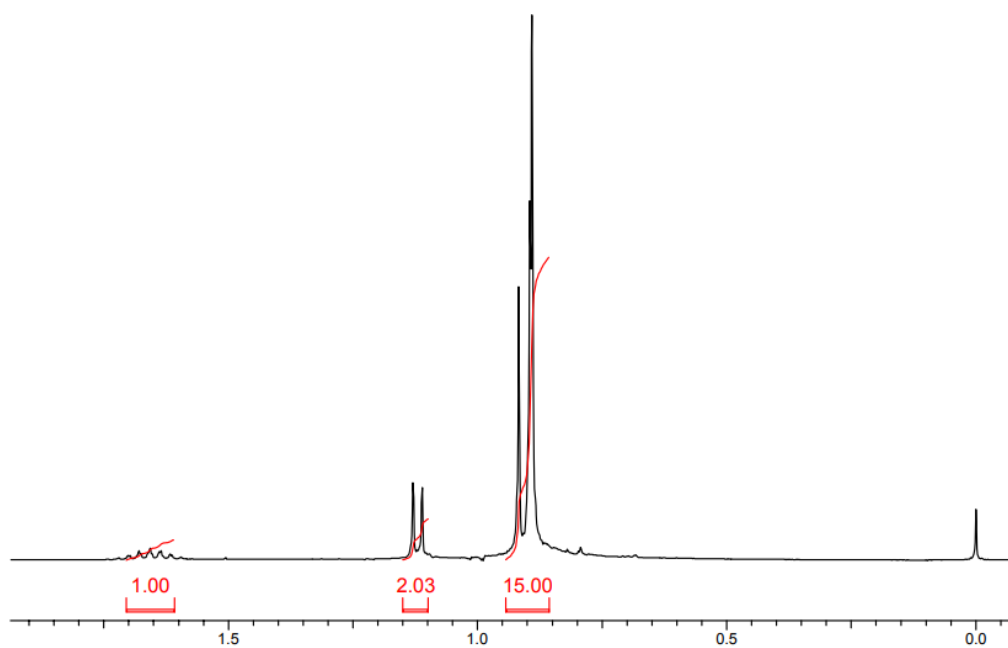
$m/z$	$I, \%$	$m/z$	$I, \%$
18	1,00	45	12,9
26	2,00	55	5,50
27	16,4	60	100
28	4,40	61	2,20
29	9,31	62	0,40
38	1,60	71	2,30
39	8,01	73	30,0
40	1,30	74	1,50
41	16,8	87	1,80
42	16,0	88	3,12
43	14,8	89	0,14

### Контрольная работа 2 «ЯМР-спектроскопия»

1. Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру  $^1\text{H}$  ЯМР



2. Интерпретируйте спектры ЯМР соединения  $C_8H_{18}$





3. В спектре ПМР неизвестного соединений имеется сигнал с химическим сдвигом 10,5 м. д. Можно ли на этом основании сделать вывод, что соединение является альдегидом, но не карбоновой кислотой или кетоном?

4. С помощью спектроскопии ПМР докажите, что в результате взаимодействия ацетилхлорида  $\text{CH}_3\text{COCl}$  с метанолом образовался метилацетат. Как определить при этом в продукте количество возможных примесей – непрореагировавшего ацетилхлорида и побочно образующейся уксусной кислоты?

5. Какой спектр ПМР можно ожидать для соединения  $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{Br}$ ?

#### **Критерии оценки:**

За работу ставится оценка «отлично», если верно решены все пять задач, «хорошо» ставится за четыре решенные задачи, «удовлетворительно» за три. Если решено не более 2 задач – «не удовлетворительно»

#### **7.2.2. Комплект отчетов по лабораторным работам**

##### **Лабораторная работа: Определение путей фрагментации и предсказание масс-спектра органических соединений**

Цель работы: исходя из структурной формулы, предсказать масс-спектр органического соединения

##### *Методика проведения*

1. Получить у преподавателя задание.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Проверить результаты, проведя поиски масс-спектров рассмотренных соединений в базах данных.
4. Подписать полученные результаты у преподавателя.
5. Оформить отчет.

##### **Лабораторная работа: Установление брутто-формулы органических соединений по спектру электронного удара**

Цель работы: установить молекулярную формулу по спектру электронного удара

##### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
1. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
2. Подписать полученные результаты у преподавателя.
3. Оформить отчет.

##### **Лабораторная работа: Расшифровка масс-спектров некоторых органических соединений. Установление молекулярной формулы и структуры**

Цель работы: установить молекулярную и структурную формулу по спектру электронного удара

##### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Подписать полученные результаты у преподавателя.
4. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Хромато-масс-спектрометрическое исследование ароматических соединений**

Цель работы: Провести хроматографическое разделение смеси ароматических соединений, проанализировать масс-спектры о-, п- и м-изомеров

#### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Провести хромато-масс-спектрометрический эксперимент согласно методическим указаниям.
3. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
4. Подписать полученные результаты у преподавателя.
5. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Хромато-масс-спектрометрия азотсодержащих гетероциклов**

Цель работы: Провести хроматографическое исследование гетероциклов, проанализировать пути фрагментации соединений

#### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Провести хромато-масс-спектрометрический эксперимент согласно методическим указаниям.
3. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
4. Подписать полученные результаты у преподавателя.
5. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Подготовка образца к ЯМР-исследованию. Подготовка образца к транспортировке на ЯМР-исследование.**

Цель работы: Освоить основные требования и этапы подготовки образцов для ЯМР-исследования

#### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Подписать полученные результаты у преподавателя.
4. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Расшифровка спектров $^1\text{H}$ магнитного резонанса**

Цель работы: установить структурную формулу соединения по спектру ПМР

#### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Подписать полученные результаты у преподавателя.
4. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Расшифровка спектров на ядрах $^{13}\text{C}$**

Цель работы: установить структурную формулу соединения по спектру  $^{13}\text{C}$

Методика проведения

1. Получить задание у преподавателя.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Подписать полученные результаты у преподавателя.
4. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Двумерная ЯМР (гомоядерная и гетероядерная)**

Цель работы: освоить принципы расшифровки спектров двумерной спектроскопии ЯМР

*Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Подписать полученные результаты у преподавателя.
4. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа: Программы для визуализации спектров ЯМР NUTS, WINNMR, ACD|Spec\_Manager**

Цель работы: освоить программы визуализации спектров двумерной спектроскопии ЯМР

*Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Кратко описать ход работы и выполняемые операции.
3. Подписать полученные результаты у преподавателя.
4. Оформить отчет.

### **Требования к оформлению отчета:**

1. Каждая работа оформляется на отдельных листах (формат А4), должна содержать титульный лист с указанием названия темы лабораторной работы, номера группы, ФИО студента и ФИО проверяющего преподавателя.
2. Под формулами должна быть приведена расшифровка буквенных обозначений.
3. У численных значений физических величин должны быть указаны единицы измерений.
4. Полученные экспериментальные величины должны быть указаны с интервалом погрешности и относительная погрешность (%).
5. Выводы должны отражать выполнение задач, поставленных для достижения цели.

## Критерии оценки:

- оценка «отлично» выставляется студенту, если лабораторная работа выполнена, даны ответы на теоретические вопросы;
- оценка «хорошо» выставляется студенту, если лабораторная работа выполнена, ответы на теоретические вопросы даны не в полном объеме;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если лабораторная работа выполнена с ошибками, не даны ответы на теоретические вопросы в полном объеме;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если лабораторная работа не выполнена.

### 7.2.3. Комплект заданий для решения задач на практических занятиях

Практические занятия по курсу не предусмотрены

## 7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

### 7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 1

№ п/п	Вопросы к экзамену
1.	Основы метода масс-спектрометрии. Основные термины и определения.
2.	Изотопный эффект, его роль в расшифровке масс-спектра.
3.	Аппаратура для масс-спектрометрии. Система ввода
4.	Источники ионизации: электронная ионизация
5.	Химическая ионизация
6.	Источники ионизации: электроспрей
7.	Полевая ионизация, полевая десорбция
8.	Пульсирующая химическая ионизация
9.	Лазерная десорбционная ионизация (MALDI)
10.	Бомбардировка быстрыми атомами
11.	Пиролитическая масс-спектрометрия
12.	Масс-анализаторы (магнитные, квадрупольные, времяпролетные (TOF), «ионная ловушка»), детекторы
13.	Определение путей фрагментации и предсказание масс-спектра органических соединений
14.	Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров («четно-электронное» правило, правило Стивенсона-Одье, правило выброса максимального алкильного радикала)
15.	Выбросы простейших нейтральных частиц
16.	Практические приемы интерпретации масс-спектров
17.	Молекулярный ион, признаки молекулярного иона
18.	Фрагментарные ионы. Направления фрагментации основных классов органических соединений
19.	Полуколичественная теория масс-спектрометрического распада
20.	Фрагментация, удаленная от места локализации заряда
21.	Многочargedные и перегруппировочные ионы.

№ п/п	Вопросы к экзамену
22.	Перегруппировка Мак-Лафферти
23.	Скелетные перегруппировки C1-C8
24.	Типы разрывов связей. Выброс нейтральных молекул
25.	Установление брутто-формулы органических соединений по спектру электронного удара
26.	Азотное правило
27.	Расчет изотопной чистоты соединений
28.	Хромато-масс-спектрометрия
29.	Сверхкритическая флюидная хроматография-масс-спектрометрия, СФХ-МС
30.	Капиллярный электрофорез-масс-спектрометрия
31.	Тандемная масс-спектрометрия
32.	Фрагментация белков, нуклеиновых кислот, микроорганизмов
33.	Протеомика
34.	Количественная масс-спектрометрия. Приемы и возможности
35.	Библиотеки масс-спектров
36.	Основы метода ЯМР. Спиновое состояние ядер.
37.	Гиромагнитная постоянная. Магнитные моменты ядер.
38.	Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-спектрометр.
39.	Импульсный метод. Классическое описание импульсного эксперимента. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР
40.	Подготовка образца к ЯМР-исследованию. Подготовка образца к транспортировке на ЯМР-исследование
41.	Химический сдвиг. Влияние зарядовой плотности на атомах. Эффекты соседних групп
42.	Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп.
43.	Примеры магнитно-анизотропных эффектов
44.	Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля
45.	Химические сдвиги $^1\text{H}$ некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы.
46.	Химические сдвиги в ПМР: Алкены. Арены
47.	Химические сдвиги в ПМР: Алкины. Альдегиды
48.	Химические сдвиги протонов -OH, -SH и -NH групп
49.	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений: Алканы и циклоалканы.
50.	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений: Алкены. Арены.
51.	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений: Алкины. Аллены
52.	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений: Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты
53.	Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений. Симметрия и эквивалентность. Хиральность, гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы.
54.	Двумерная гомоядерная ЯМР-спектроскопия
55.	Двумерная гетероядерная ЯМР-спектроскопия
56.	2D спектры белков. COSY, TOCSY, NOESY.
57.	2D спектры белков. Метод последовательного отнесения сигналов
58.	Методы гетероядерной корреляции
59.	Методы 3D спектроскопии белков
60.	Программы для визуализации спектров ЯМР NUTS, WINNMR,

№ п/п	Вопросы к экзамену
	ACD Spec_Manager

### 7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
1	Экзамен (устно)	«отлично»	Теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены
		«хорошо»	Теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов, некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно. Все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, некоторые виды заданий выполнены с ошибками
		«удовлетворительно»	Теоретическое содержание курса освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, возможно, содержат ошибки
		«неудовлетворительно»	Теоретическое содержание курса не освоено, необходимые практические навыки работы не сформированы, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к существенному повышению

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
			качества выполнения учебных заданий

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Вершинин В.И., Власова И.В., Никифорова И.А.	Аналитическая химия [Электронный ресурс]: учебник / В. И. Вершинин, И. В. Власова, И. А. Никифорова. – Изд. 4-е, стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2022. – 428 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература).URL: – ISBN 978-5-8114-9166-7.	Учебник	2022	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/book/187750">https://e.lanbook.com/book/187750</a>
2	Сутягин В.М., Ляпков А.А.	Физико-химические методы исследования полимеров [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Изд. 3-е, испр. – Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 140 с. : ил. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN 978-5-8114-2712-3	Учебное пособие	2018	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/reader/book/99212">https://e.lanbook.com/reader/book/99212</a>
3	Перегончая О.В., Соколова С.А.	Практикум по аналитической химии. Физико-химические методы анализа [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Воронеж. гос. аграр. ун-т им. Императора Петра I. – Воронеж : ВГАУ им. Петра I, 2017. – 100 с	Учебное пособие	2017	ЭБС «IPRBook» <a href="http://www.iprbookshop.ru/72731.html">http://www.iprbookshop.ru/72731.html</a>
4	Сост. Сульдина Т.И.	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа [Электронный ресурс] : лабораторный практикум / : Ай Пи Эр Медиа, 2018. – 118 с. : ил. – ISBN 978-5-4486-0057-9.	Лабораторный практикум	2018	ЭБС «IPRBook» <a href="http://www.iprbookshop.ru/70757.html">http://www.iprbookshop.ru/70757.html</a>
5	Ганеев А.А. и др.	Аналитическая химия [Электронный	Учебник	2019	ЭБС «Лань»



№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
		ресурс] : методы разделения веществ и гибридные методы анализа: учебник / Санкт-Петербург : Лань, 2019. – 332 с. : ил. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN 978-5-8114-3394-0.			<a href="https://e.lanbook.com/book/11389">https://e.lanbook.com/book/11389</a> 9

## 8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Устынюк Ю.А.	Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Ч. 1. (Вводный курс) / Москва : Техносфера, 2016. – 292 с. – (Мир химии). – URL: . - Режим доступа: Цифровой образовательный ресурс IPR SMART. – ISBN 978-5-94836-410-0. – Текст : электронный.	Учебное пособие	2016	ЭБС «IPRbooks»
1	Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольте К.	Определение строения органических соединений = Structure Determination of Organic Compounds : таблицы спектральных данных / пер. с англ. Б. Н. Тарасевича. – Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний : Мир, 2006. – 439 с. – (Методы в химии). – Предм. указ.: с.	Справочное пособие	2006	

<b>№ п/п</b>	<b>Авторы, составители</b>	<b>Заглавие (заголовок)</b>	<b>Тип (учебник, учебное пособие, учебно- методическое пособие, практикум, др.)</b>	<b>Год издания</b>	<b>Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС</b>
		411-428. – Библиогр. в конце гл. – ISBN 5-94774-572-0. – ISBN 5-03-003586-9 : 322-00. – Текст : непосредственный.			
2	Жебентяев А.И., Жерносек А.К., Талуть И.Е.	Аналитическая химия. Химические методы анализа [Электронный ресурс] : учеб. пособие / 2-е изд., стер. – Минск : Новое знание ; Москва : ИНФРА-М, 2014. – 542 с. : ил. – (Высшее образование. Бакалавриат). – ISBN 978-5-16004685-3.	Учебное пособие	2014	ЭБС «ZNANIUM.CO M»
3	Щеколдина Т.В., Ольховатов Е.А., Степовой А.В.	Физико-химические основы и общие принципы переработки растительного сырья [Электронный ресурс] : учеб. пособие / СанктПетербург : Лань, 2017. – 208 с. : ил. – (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2697-3.	Учебное пособие	2017	ЭБС «Лань»
4	Лебухов В.И. Окара А.И., Павлюченкова Л.П.	Физико-химические методы исследования [Электронный ресурс] : учебник / Санкт-Петербург : Лань, 2012. – 480 с. : ил. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN 978-5-8114-1320-1.	Учебник	2012	ЭБС «Лань»

### 8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

– Бутлеровские сообщения [Электронный ресурс] : многопредмет. науч. журн. / ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие». – Электрон. журнал. – Казань : ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие», 1999- . Режим доступа к журн.: <http://butlerov.com/stat/reports/view.asp?lang=ru>

– Химия в интересах устойчивого развития [Электронный ресурс] : междунар. науч. журн. / Сибирское отделение РАН. – Электрон. журнал. – Новосибирск : Издательство СО РАН, 1999- . Режим доступа к журн. <http://www.sibran.ru/journals/Hviur/>

– Oriental Journal Of Chemistry. Научный рецензируемый журнал открытого доступа. Страна: Индия. Язык: английский. Публикует результаты научных исследований в области общей химии, биохимии, спектроскопии, химии окружающей среды. Доступен полнотекстовый архив с 2008 года: <http://www.orientjchem.org/Archive.php>

### 8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия - бессрочно
2	Office Standart	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия - бессрочно; Договор № 727 от 20.07.2016г., срок действия - бессрочно

### 8.5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-215	Стол ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
2	Лаборатория «Аналитической химии и физико-химических методов анализа» Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. А-207	Стол лабораторный островной , полка для посуды, столы лабораторные с полкой, мойка нержавеющей, печь муфельная -, сушильный шкаф Snol58/350, мойки с сушилкой, шкаф

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
		вытяжной, столы письменные, тумбы для посуды и реактивов, центрифуги лабораторные ОПи-3, аналитические весы ВЛР-200, столы вибростойкие, фотометр фотоэлектрический. столы для приборов, шкафы для посуды и реагентов, стол, аквадистиллятор, весы технические, технологические приставки, спектрофотометр СФ-103
3	Помещение для самостоятельной работы студентов. Г-401	Стол ученический - 26 шт., стул - 26 шт., ком Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет.