

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

Б1.В.ДВ.02.01  
(индекс дисциплины)

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

Инструментальные методы анализа в технологии производства лекарственных субстанций  
(наименование дисциплины)

по направлению подготовки  
18.03.01 Химическая технология

направленность (профиль)  
Химическая технология тонкого органического синтеза и лекарственных препаратов

Форма обучения: очная

Год набора: 2026

Общая трудоемкость: 43Е

**Распределение часов дисциплины по семестрам**

Семестр	8	Итого
Форма контроля	зачет	
Вид занятий		
Лекции	24	<b>24</b>
Лабораторные	36	<b>36</b>
Практические	24	<b>24</b>
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,25	<b>0,25</b>
Контактная работа	84,25	<b>84,25</b>
Самостоятельная работа	59,75	<b>59,75</b>
Контроль		
<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>144</b>

Рабочую программу составил(и):

профессор, 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

18.03.01 Химическая технология

---

**Срок действия рабочей программы дисциплины до «31» августа 2030 г.**

УТВЕРЖДЕНО

На заседании Центра медицинской химии  
(протокол заседания № 1 от «28» августа 2025 г.).

### 1. Цель освоения дисциплины

Формирование у студентов представлений о современных аналитических, в том числе инструментальных, методах контроля качества продуктов тонкого органического синтеза и лекарственных препаратов, а также их идентификации и установления структуры.

### 2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Физика», «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», «Высшая математика», «Аналитическая химия и основы физико-химических методов анализа»

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Общая химическая технология», «Химическая технология органических веществ», «Химическая технология тонкого органического синтеза и синтеза фармацевтических субстанций», «Аналитический контроль качества сырья и продукции», «Инструментальные методы анализа в технологии тонкого органического синтеза», «Подготовка к процедуре защиты и процедура защиты ВКР».

### 3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК-5 Способен использовать современные инструментальные методы в анализе, изучении структуры и свойств веществ и материалов, исследовании процессов технологии тонкого органического синтеза и производства лекарственных субстанций	ПК-5.1 Знает теоретические основы аналитической, физической химии и законы физики, используемые в современных инструментальных методах анализа и особенности объектов анализа в технологии тонкого органического синтеза и производства лекарственных субстанций	Знать: основные законы физической химии, лежащие в основе физико-химических методов анализа
		Уметь: выбирать методы инструментального анализа в зависимости от задач производства
		Владеть: методологией инструментальных методов анализа и методологией литературного поиска методик анализа биологически активных веществ
	Пк-5.2 Проводит анализ веществ и материалов при помощи инструментальных методов для решения задач технологии тонкого органического синтеза	Знать: принципы работы и устройство современного аналитического оборудования, программное обеспечение для проведения и обработки результатов анализа
		Уметь: применять стандартные операции аналитического контроля к веществам в производстве лекарственных субстанций
		Владеть:

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
		<p>- навыками работы на современном оборудовании, применяемом в инструментальном анализе</p> <p>- техникой проведения инструментального анализа продуктов тонкого органического синтеза</p>
	ПК-5.3 Формулирует заключение и выводы по результатам химического анализа объектов тонкого органического синтеза и лекарственных субстанций и использует результаты для оптимизации технологического процесса их производства	<p>Знать:</p> <p>- теоретические основы интерпретации результатов инструментального исследования</p> <p>- особенности аналитических свойств биологически активных веществ</p> <p>Уметь:</p> <p>применять основные положения аналитической химии к интерпретации результатов эксперимента по исследованию лекарственных субстанций</p>
		<p>Владеть:</p> <p>навыками проведения расчётов результатов инструментального исследования и оформления протоколов анализа продуктов тонкого органического синтеза и биологически активных веществ</p>

## 1. 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 средства)
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	8	2	-	-	
	Лек 2	Аппаратура для масс-спектрометрии. Система ввода, источники ионизации, масс-анализаторы, детекторы	8	2	-	-	
	Пр 1	Определение путей фрагментации и предсказание масс-спектра органических соединений	8	2	-	-	
	Лек 3	Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Практические приемы интерпретации масс-спектров.	8	2	-	-	
	Лек 4	Фрагментные ионы. Направления фрагментации основных классов органических соединений	8	2	-	-	
	Пр 2, Пр 3	Установление брутто-формулы органических соединений по спектру электронного удара	8	4	-	-	
	Лек 5	Хромато-масс-спектрометрия	8	2	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лаб 1	Расшифровка масс-спектров некоторых органических соединений. Установление молекулярной формулы и структуры	8	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Лек 6	Количественная масс-спектрометрия. Приемы и возможности	8	2	-	-	
	Лаб 2	Хромато-масс-спектрометрическое исследование ароматических соединений	8	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Пр 4	Контрольная работа	8	2	-	-	Контрольная работа №1
	Лаб 3	Хромато-масс-спектрометрия азотсодержащих гетероциклов	8	4			Отчет по лабораторной работе
	Лаб 4	Установление последовательности аминокислотных звеньев в пептидах	8	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	СР 1	Проработка тем раздела, подготовка к лабораторным работам и зачету	8	20	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
Раздел 2. Методы ЯМР	Лек 7	Основы метода ЯМР. Спиновое состояние ядер. Гиромагнитная постоянная. Магнитные моменты ядер. Основные принципы эксперимента ЯМР. CW-	8	2	-	-	
	Лек 8	Химический сдвиг. Влияние зарядовой плотности на атомах. Эффекты соседних групп. Химические сдвиги $^1\text{H}$ некоторых органических соединений. Химические сдвиги $^{13}\text{C}$ некоторых групп органических соединений.	8	2	-	-	
	Лаб 5	Подготовка образца к ЯМР-исследованию. Подготовка образца к транспортировке на ЯМР-исследование.	8	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Пр 5, 6	Расшифровка спектров $^1\text{H}$ магнитного резонанса	8	4	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Пр 7	Расшифровка спектров на ядрах $^{13}\text{C}$	8	2	-	-	
	Пр 8	Двумерная ЯМР (гомоядерная и гетероядерная)	8	2	-	-	
	Лаб 6	Программы для визуализации спектров ЯМР NUTS, WINNMR, ACD Spec_Manager	8	4	-	-	Отчет по лабораторной работе
	Пр 9	Контрольная работа по расшифровкам спектров ЯМР	8	2	-	-	Контрольная работа №2
	СР 2	Проработка лекционного материала, тем раздела, подготовка к лабораторной работе, контрольной работе, зачету	8	20	-	-	
Раздел 3. Хроматография и капиллярный электрофорез	Лек 9	Газовая хроматография. Основы метода. Возможности в контроле технологии тонкого органического синтеза и лекарственных субстанций	8	2			



Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 10	ВЭЖХ. Основы метода. Аппаратура. Возможности в контроле технологии тонкого органического синтеза и лекарственных субстанций. ТСХ.	8	2			
	Лаб 7	Количественные методы в газовой хроматографии	8	4			Отчет по лабораторной работе
	Пр 10	Расчеты в хроматографическом анализе	8	2			
	Лаб 8	Знакомство с работой жидкостного хроматографа. ТСХ	8	4			Отчет по лабораторной работе
	Пр 11	Количественные методы в хроматографии	8	2			
	Пр 12	Контрольная работа по теме «Хроматографические методы анализа»	8	2			Контрольная работа №3
	Лек 11	Зональный капиллярный электрофорез. Принцип метода. Аппаратура.	8	2			

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 12	Виды капиллярного электрофореза	8	2			
	Лаб 9	Гель-электрофорез	8	4			Отчет по лабораторной работе
	СР 3	Проработка лекционного материала, тем раздела, подготовка к лабораторной работе, контрольной работе, зачету	8	19,75			
	ПА	Промежуточная аттестация	8	0,25	-	-	Вопросы к зачету №№ 1-60
<b>Итого:</b>				<b>144</b>	<b>-</b>		

## 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)?

## Раздел 3

### Хроматография и капиллярный электрофорез

Темы лекций: Теоретические основы хроматографии. Газовая хроматография. ВЭЖХ. Капиллярный электрофорез

Темы практических занятий: Решение задач по теме «Хроматографические методы анализа».

Контрольная работа по теме

Изучив данный модуль, студент должен: сформировать представление о состоянии современного газохроматографического и ВЭЖХ анализа, капиллярного электрофореза, их возможностях, основных направлениях и тенденциях развития

#### **Знать:**

- теоретические основы хроматографии и капиллярного электрофореза, основные методы качественного и количественного хроматографического анализа;
- аппаратное оформление процесса

#### **Уметь:**

- определять основные характеристики хроматографического процесса из хроматограммы; интерпретировать экспериментальные результаты
- подбирать оптимальные условия проведения хроматографического разделения

#### **Владеть:**

- методиками поиска подходящего варианта разделения веществ; способами оценки погрешности физико-химического эксперимента
- навыками работы на современном хроматографическом оборудовании.

#### 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 физико-химических процессов удерживания сорбатов различного строения на различных по природе неподвижных фазах
- Ответить на контрольные вопросы:
  1. Дайте определение хроматографии.
  2. Какие особенности хроматографии позволяют достичь лучшего разделения веществ с близкими свойствами по сравнению с другими методами разделения.
  3. Перечислите способы получения хроматограмм. Что используется в качестве элюентов в каждом из способов?
  4. Как можно осуществлять идентификацию определяемых соединений в смеси после их хроматографического разделения?
  5. Что такое индексы удерживания? Какие системы индексов удерживания используют в хроматографии (преимущественно в газовой)?
  6. Перечислите способы количественного анализа в хроматографии. Сравните их между собой.
  7. Сравните два режима разделения в газовой хроматографии – изотермический и программирование температуры.
  8. Перечислите детекторы в газовой хроматографии.
  9. Перечислите особенности и преимущества высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ).
  10. Какие варианты метода используют в аналитической практике?
  11. Какие сорбенты используют в ВЭЖХ? Каким требованиям они должны отвечать?
  12. Почему наиболее популярные сорбенты в ВЭЖХ – силикагель и, особенно, модифицированные силикагели? Как проводят модификацию силикагеля?
  13. Чем определяется элюирующая способность подвижной фазы в жидкостной хроматографии?
  14. Как подбирают состав подвижной фазы в жидкостной хроматографии?
  15. На чем основано разделение веществ в методе капиллярного электрофореза (КЭ).
  16. Какие варианты капиллярного электрофореза Вы знаете? Чем определяется время миграции веществ в КЭ?
  17. В чем причина возникновения электроосмотического потока (ЭОП)? Какие факторы влияют на его направление и величину?
  18. Укажите направление движения ЭОП, катионов и анионов в немодифицированном кварцевом капилляре при приложении напряжения.
  19. Как можно обратить ЭОП? Для чего используют этот прием в КЭ?
  20. Укажите направление движения ЭОП, катионов, анионов в модифицированном капилляре при приложении напряжения. Нарисуйте общий вид электрофореграммы.

### 7. Оценочные средства

#### 7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
8	ПК-5	Вопросы к зачету 1-60 Задачи к зачету 1-30
8	ПК-5	Отчеты по лабораторным работам 1-9
8	ПК-5	Контрольные работы 1-3

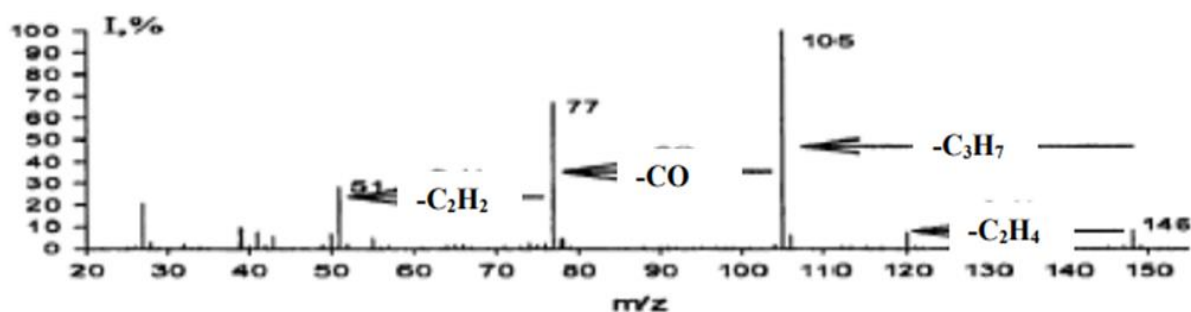
## 7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

### 7.2.1. Контрольные работы

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

Вариант 1.

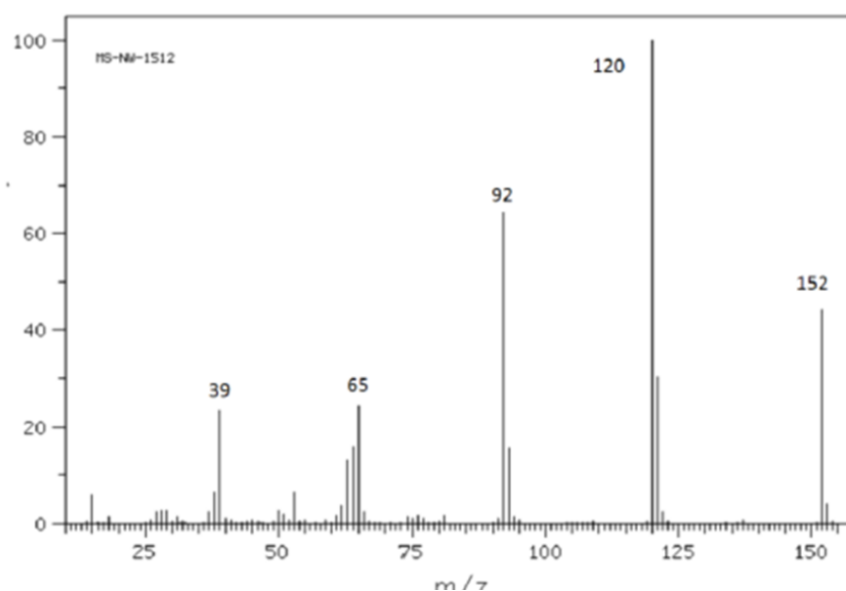
1. Составьте схему фрагментации молекулярного иона бутирофенона по масс-спектру



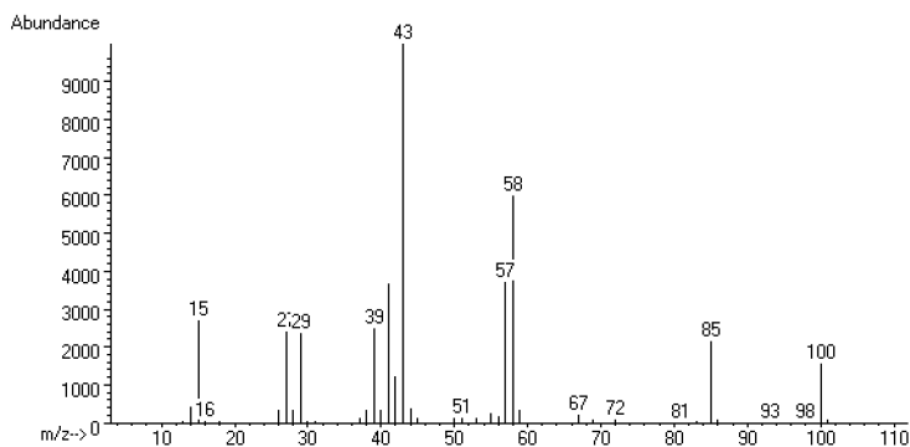
2. Определите элементный состав приведенных соединений по интенсивностям изотопных пиков молекулярного иона:

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.



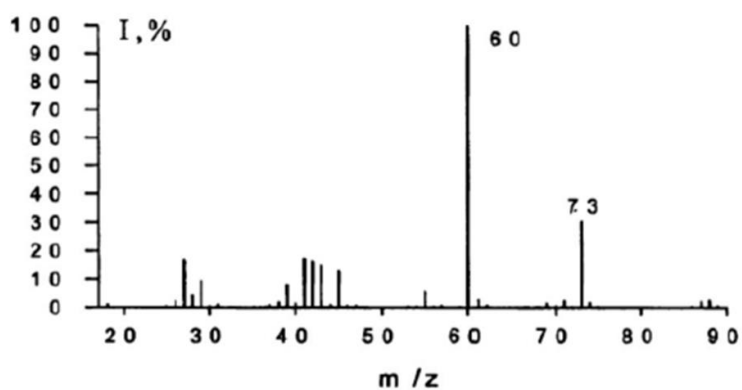
4. Расшифруйте масс-спектр, определите брутто-формулу соединения



$m/z$	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

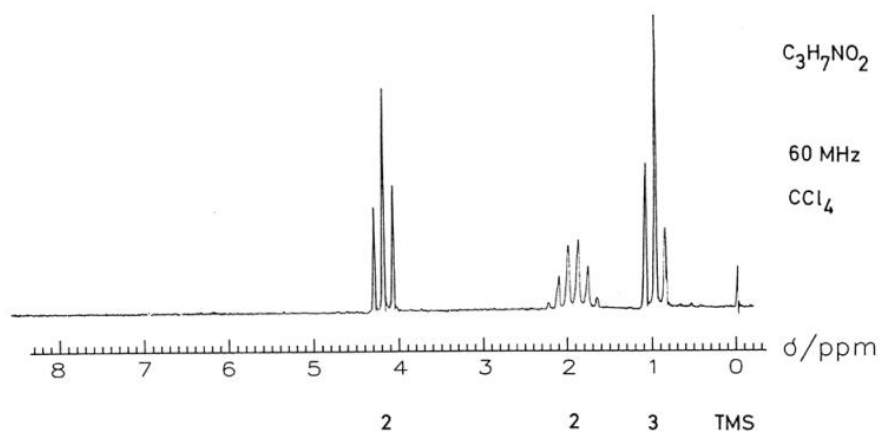




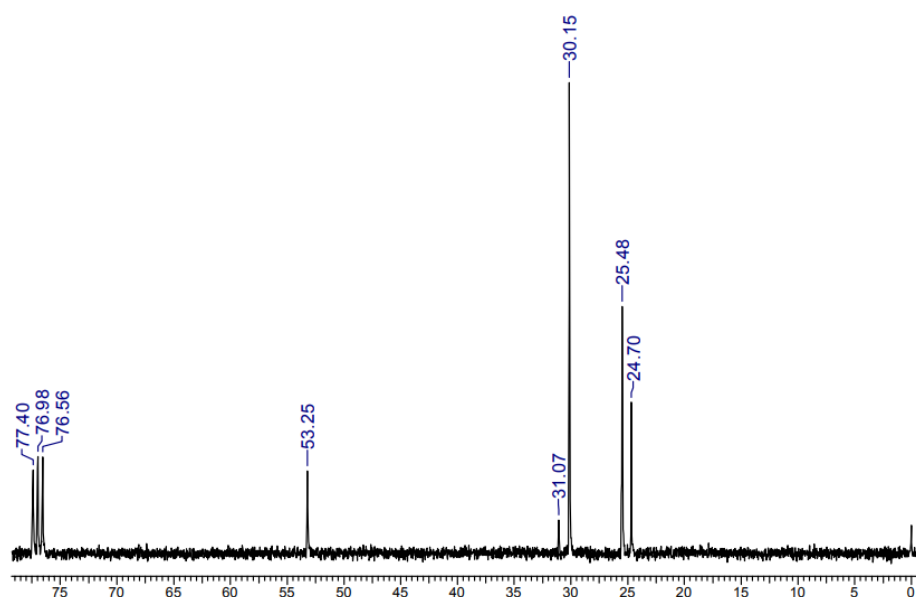
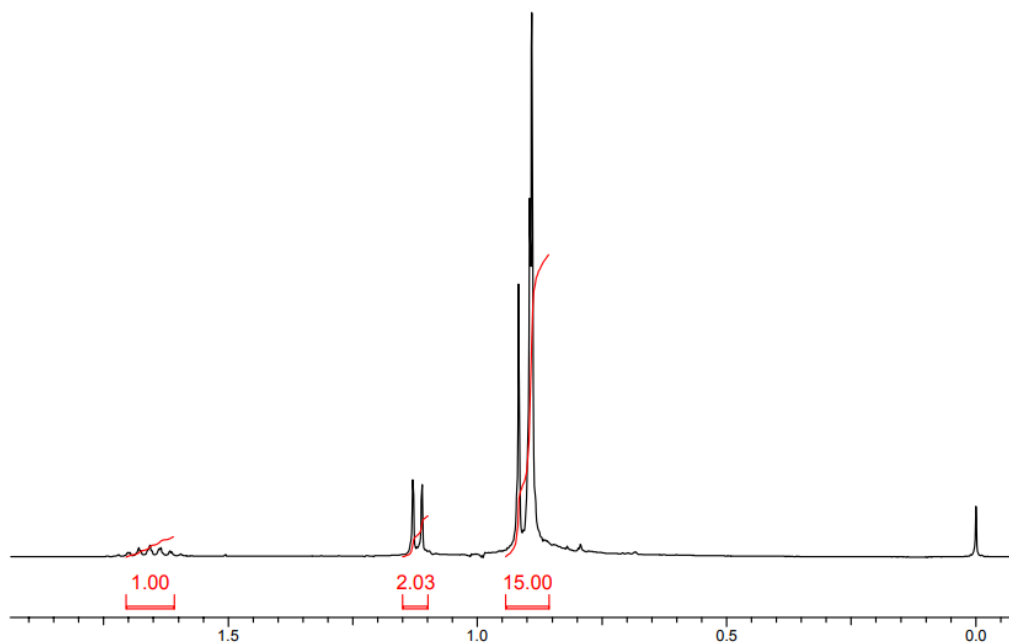
m/z	I, %	m/z	I, %
18	1,00	45	12,9
26	2,00	55	5,50
27	16,4	60	100
28	4,40	61	2,20
29	9,31	62	0,40
38	1,60	71	2,30
39	8,01	73	30,0
40	1,30	74	1,50
41	16,8	87	1,80
42	16,0	88	3,12
43	14,8	89	0,14

### 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  $\text{C}_8\text{H}_{18}$



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»

### **Контрольная работа 3 «Хроматографические методы анализа»**

#### **Вариант 1**

1. Удерживаемые объёмы гептана, октана и бутилацетата соответственно равны 118, 204 и 173 мл. Рассчитать индекс Ковача для бутилацетата.
2. Расстояние от момента ввода пробы до выхода несорбирующегося компонента составляет 3 мм, до выхода бензола 26 мм, до выхода толуола 48 мм. Ширина пиков бензола и толуола у основания составляет соответственно 4 и 8 мм. Длина колонки 1,5 м. Вычислить высоту, эквивалентную теоретической тарелке.
3. На хроматограмме обнаружены пики о-ксилола, 1-этил-2-метилбензола, 1-изопропил-3-метилбензола, а также кумола. Высота пиков равна соответственно 128, 253, 27 и 58 мм. Ширина пиков на половине высоты 2,4, 5,8, 2,7 и 4,9 мм соответственно. Рассчитать процентное содержание компонентов в смеси.
4. При анализе смеси газов были обнаружены 2-метилпентан, метиламин, 2-метилбутан и пропан. Площадь их пиков на хроматограмме составила 132, 84, 219 и 114 мм<sup>2</sup> соответственно. В смесь был добавлен гексан в качестве вещества-стандарта с концентрацией 10 мг/л. Площадь пика гексана составила 126 мм<sup>2</sup>. Рассчитать концентрацию компонентов в пробе, учитывая, что  $f_i$  будет равен 1.13, 1.26, 1.32 и 1.48 соответственно.

#### **Вариант 2**

1. Времена удерживания пентана, изо-бутанола и гексана соответственно равны 54, 67 и 89 с. Рассчитать индекс Ковача для изо-бутанола.
2. Расстояние от момента ввода пробы до выхода несорбирующегося компонента составляет 2,5 мм, до выхода гексана 38 мм, до выхода гептана 62 мм. Ширина пиков гексана и гептана у основания составляет соответственно 3 и 7 мм. Длина колонки 2,5 м. Вычислить высоту, эквивалентную теоретической тарелке.
3. На хроматограмме обнаружены пики метиламина, диметиламина, пиридина, а также 6-метилурацила. Высота пиков равна соответственно 56, 72, 13 и 8 мм. Число теоретических тарелок равно 5000. Время удерживания компонентов равно 34, 42, 58 и 72 с. при скорости диаграммной ленты 3 см/мин. Рассчитать процентное содержание компонентов в смеси.
4. К 10 мл анализируемой смеси было добавлено вещество-стандарт н-бутанол в количестве 1 мл с концентрацией 20 мг/л. На хроматограмме полученной смеси были обнаружены пики изо-пропанола, н-бутанола, изо-пентанола, пропилацетата и метилметакрилата, имеющих площадь 92, 48, 15, 22 и 34 мм<sup>2</sup> соответственно.  $f_i$  будет равен 0.87, 1.04, 1.17 и 1.22 для изо-пропанола, изо-пентанола, пропилацетата и метилметакрилата соответственно. Найти концентрацию компонентов в смеси.

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

##### **Лабораторная работа 1: Расшифровка масс-спектров некоторых органических соединений. Установление молекулярной формулы и структуры**

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 2: 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.
1. Оформить отчет.

### **Лабораторная работа 3: 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 4: Установление последовательности аминокислотных звеньев в пептидах**

Цель работы: расшифровать аминокислотную последовательность пептида по его масс-спектру

#### *Методика проведения*

1. Получить задание у преподавателя.
2. Провести расшифровку масс-спектра пептида согласно методическим указаниям.
3. Получить АК последовательность.
4. Подписать полученные результаты у преподавателя.
5. Оформить отчет.

## **Лабораторная работа 5: 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 6: 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.

## **Лабораторная работа 7: Количественные методы газовой хроматографии. Определение содержания массовой доли основного вещества в *n*-бутаноле методом внутреннего стандарта**

### **Форма отчета по лабораторной работе**

В отчете должны быть заполнены следующие пункты:

Цель работы

Задачи работы

Аппаратура и объекты исследования

Условия работы хроматографа

Температура испарителя ..... °C

Температура термостата колонок ..... °C

Температура детектора ..... °C

Газ-носитель . . . . .  
Скорость потока газа-носителя . . . . .  $см \times мин^{-1}$   
Ток моста . . . . .  $мА$   
Скорость движения диаграммной ленты самописца . . . .  $мм \times ч^{-1}$   
Объем вводимой пробы . . . . .

#### Выполнение работы

*Кратко описывается ход работы и выполняемые операции*

#### Выводы

*Контрольные вопросы:*

1. В чем сущность метода внутреннего стандарта, его достоинства и недостатки перед методами внутренней нормализации и абсолютной градуировки?
2. Какие требования необходимо соблюдать при анализе по методу внутреннего стандарта?
3. Как выполняется градуировка хроматографа по методу внутреннего стандарта?
4. Описать принцип действия ДИП?
5. От чего зависит чувствительность ДИП?
6. Описать принцип действия ПФД.
7. Описать принцип действия ЭЗД.
8. Описать принцип действия ТИД.

### **Лабораторная работа 8: Знакомство с работой жидкостного хроматографа. ТСХ**

Цель работы: освоить принципы работы на жидкостном хроматографе и приемы ТСХ. Провести определение содержания кофеина в напитках методом ВЭЖХ и определение аминокислот методом ТСХ.

В отчете должны быть заполнены следующие пункты:

#### Цель работы

#### Задачи работы

#### Аппаратура и объекты исследования

#### Условия работы хроматографа

Элюент . . . . .  
Скорость подачи элюента . . . . .  $мл \times мин^{-1}$   
Хроматографическая колонка . . . . .  
Объем вводимой пробы . . . . .  
Длина волны детектора.....нм

#### Выполнение работы

*Кратко описывается ход работы и выполняемые операции*

Для ТСХ

#### Условия хроматографирования

Описывается кратко ход работы. Указываются величины  $R_f$  стандартов. Зарисовывается или вклеивается хроматограмма. Делаются выводы по составу смеси аминокислот.

#### Выводы

### **Лабораторная работа 9: Гель-электрофорез**

В отчете должны быть заполнены следующие пункты:

#### Цель работы

#### Задачи работы

#### Аппаратура и объекты исследования

#### Условия проведения гель-электрофореза

## Выполнение работы

*Кратко описывается ход работы и выполняемые операции*

## Выводы

### **Требования к оформлению:**

1. Каждая работа должна быть оформлена на отдельных листах, 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.
5. Выводы обязательны.

### **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. В отчете должны быть указаны уравнения проведенных химических реакций.
3. Под формулами должна быть приведена расшифровка буквенных обозначений;
4. У численных значений физических величин должны быть указаны единицы измерений;
5. Полученные экспериментальные величины должны быть указаны с интервалом погрешности и относительная погрешность (%).
6. Графики к лабораторным работам и кривые титрования должны быть построены на миллиметровой бумаге (выдается на занятии) по правилам построения графиков.
7. Выводы должны отражать выполнение задач, поставленных для достижения цели.
8. Отчеты-презентации прилагаются в виде распечатанных слайдов. Защита проводится публично. Вопрос – ответ в устной форме.

### **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.

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

### **7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации**

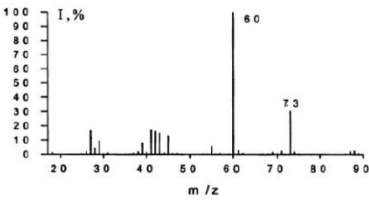
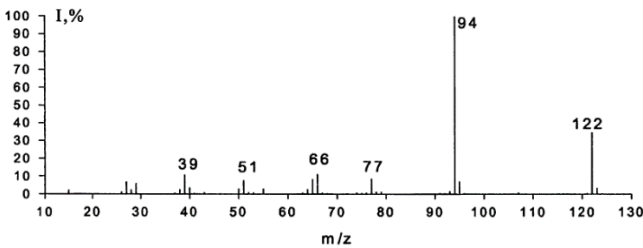
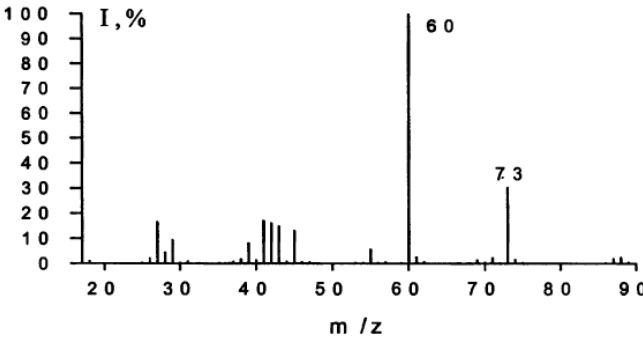
№ п/п	Вопросы к зачету
1.	Основы метода масс-спектрометрии. Основные термины и определения.
2.	Изотопный эффект, его роль в расшифровке масс-спектра.
3.	Аппаратура для масс-спектрометрии. Система ввода
4.	Источники ионизации: электронная ионизация
5.	Химическая ионизация
6.	Источники ионизации: электроспрей
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, правилом 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.	Многочарядные и перегруппировочные ионы.
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



№ п/п	Вопросы к зачету
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 -ОН, -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.	Газовая хроматография. Основы и возможности метода
55.	Высокоэффективная жидкостная хроматография. Основы метода, аппаратура
56.	Методы количественного хроматографического анализа
57.	Тонкослойная хроматография. Возможности метода
58.	Теоретические основы капиллярного электрофореза
59.	Изоэлектрофокусировка, тахофорез
60.	Гель-электрофорез

### Задачи к зачету

№ п/п	Задачи к зачету
1.	Определите количество атомов углерода в органическом соединении, если пик $M+1$ в масс-спектре имеет интенсивность 8,24.
2.	Сколько протонов находится в соседней магнитно-эквивалентной группе, если сигнал от группы протонов записывается в ЯМР спектре в виде квартета.
3.	Объясните происхождение в масс-спектре электронной ионизации этанола пиков со значениями $m/z$ 46, 45, 31, 29, 15.
4.	Сколько сигналов будет в спектре протонного магнитного резонанса незамещенного бензола? С какой мультиплетностью?
5.	Определите элементный состав молекулярных ионов по интенсивности изотопных пиков (спектр представлен в форме: величина $m/z$ (интенсивность к максимальному пику в спектре в %): 128 (100), 129 (11,0), 130 (0,5))
6.	Определите элементный состав молекулярных ионов по интенсивности изотопных пиков (спектр представлен в форме: величина $m/z$ (интенсивность к максимальному пику в спектре в %): 206 (80), 207 (8,8), 208 (79), 209 (8,8), 210 (0,4))
7.	Идентифицируйте соединение по масс-спектру

№ п/п	Задачи к зачету																																																
	<div></div> <table><tr><th>m/z</th><th>I, %</th><th>m/z</th><th>I, %</th></tr><tr><td>18</td><td>1,00</td><td>45</td><td>12,9</td></tr><tr><td>26</td><td>2,00</td><td>55</td><td>5,50</td></tr><tr><td>27</td><td>16,4</td><td>60</td><td>100</td></tr><tr><td>28</td><td>4,40</td><td>61</td><td>2,20</td></tr><tr><td>29</td><td>9,31</td><td>62</td><td>0,40</td></tr><tr><td>38</td><td>1,60</td><td>71</td><td>2,30</td></tr><tr><td>39</td><td>8,01</td><td>73</td><td>30,0</td></tr><tr><td>40</td><td>1,30</td><td>74</td><td>1,50</td></tr><tr><td>41</td><td>16,8</td><td>87</td><td>1,80</td></tr><tr><td>42</td><td>16,0</td><td>88</td><td>3,12</td></tr><tr><td>43</td><td>14,8</td><td>89</td><td>0,14</td></tr></table>	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
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																																														
8.	<p>Ниже представлен масс-спектр ЭУ органического соединения. Укажите, какому из перечисленных ниже соединений принадлежит этот спектр.</p> <p>А) бензойная кислота, б) <i>o</i>-этилфенол, в) <i>o</i>-метокситолуол, г) <i>n</i>-этилфенол, д) фенилэтиловый эфир, е) <i>n</i>-толилметилвый эфир, ж) 2-фенилэтиловый спирт, з) 1-фенилэтиловый спирт, и) 2,4-диметилфенол, к) 2,6-диметилфенол.</p> <div></div>																																																
9.	<p>1. Идентифицируйте соединение по спектру электронного удара</p> <div></div> <table><tr><th>m/z</th><th>I, %</th><th>m/z</th><th>I, %</th></tr><tr><td>18</td><td>1,00</td><td>45</td><td>12,9</td></tr><tr><td>26</td><td>2,00</td><td>55</td><td>5,50</td></tr><tr><td>27</td><td>16,4</td><td>60</td><td>100</td></tr><tr><td>28</td><td>4,40</td><td>61</td><td>2,20</td></tr><tr><td>29</td><td>9,31</td><td>62</td><td>0,40</td></tr><tr><td>38</td><td>1,60</td><td>71</td><td>2,30</td></tr><tr><td>39</td><td>8,01</td><td>73</td><td>30,0</td></tr><tr><td>40</td><td>1,30</td><td>74</td><td>1,50</td></tr><tr><td>41</td><td>16,8</td><td>87</td><td>1,80</td></tr><tr><td>42</td><td>16,0</td><td>88</td><td>3,12</td></tr><tr><td>43</td><td>14,8</td><td>89</td><td>0,14</td></tr></table>	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
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																																														
10.	Установите структуру ациклического соединения состава C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> , спектр ПМР которого характеризуется двумя сигналами равной интенсивности с химическими сдвигами 2,1 и 3,7 м. д																																																
11.	При интегрировании спектра протонного резонанса смеси ацетона, метилхлорида и хлороформа были получены следующие высоты ступенек на интегральной кривой: 10, 18 и 36 мм для сигналов при δ 87,27, 5,30 и 2,17 соответственно В каких молярных соотношениях присутствуют эти три вещества?																																																
12.	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?																																																
13.	С помощью спектроскопии ПМР докажите, что в результате взаимодействия ацетилхлорида CH <sub>3</sub> COCl с метанолом образовался метилацетат. Как определить при этом в продукте количество возможных примесей - непрореагировавшего ацетилхлорида и побочно образующейся уксусной кислоты?																																																

№ п/п	Задачи к зачету
14.	Напишите структуру или структуры, которые соответствуют следующим данным ПМР: $C_3H_3Cl_5$ триплет $\delta=4.52$ м.д., 1H, дублет $\delta=6.07$ м.д., 2H
15.	Напишите структуру или структуры, которые соответствуют следующим данным ПМР: $C_4H_9Br$ дублет $\delta=1.04$ м.д. 6H, мультиплет $\delta=1.95$ м.д. 1H, дублет $\delta=3.33$ м.д. 2H
16.	Напишите структуру или структуры, которые соответствуют следующим данным ПМР: $C_{10}H_{14}$ синглет $\delta=1.30$ м.д. 9H, синглет $\delta=7.28$ м.д. 5H
17.	Хроматографический анализ показал, что в смеси содержится толуол, стирол и кумол с площадями пиков 151, 219 и 91 мм <sup>2</sup> соответственно. Рассчитайте процентное содержание компонентов в пробе.
18.	При хроматографировании газа, содержащего вторичные амины, на хроматограмме получен пик с временем удерживания 381 с (жидкая неподвижная фаза сквалан, температура колонки 100 °C). В тех же условиях времена удерживания н-гептана и н-октана равны 348 и 372 с соответственно. В анализируемом газе могут находиться ди-изо-пропиламин (индекс удерживания Ковача 644), ди-н-пропиламин (индекс удерживания Ковача 746), ди-втор-бутиламин (индекс удерживания Ковача 837). Какой амин содержится в анализируемой пробе?
19.	На хроматограмме обнаружены пики о-ксилола, 1-этил-2-метилбензола, 1-изопропил-3-метилбензола, а также кумола. Высота пиков равна соответственно 128, 253, 27 и 58 мм. Ширина пиков на половине высоты 2.4, 5.8, 2.7 и 4.9 мм соответственно. Рассчитать процентное содержание компонентов в смеси.
20.	Расстояние между линией старта и фронта растворителя на хроматограмме оказалось равным 10,0 см, линией старта и центром пятна вещества – 6,0 см. Рассчитайте величину $R_f$ .
21.	Для определения содержания остаточного бензола в продукте алкилирования бензола пропиленом к навеске образца продукта 5.47 г добавили 0.10 г толуола (внутренний стандарт). Смесь перемешали и записали для нее хроматограмму. Площади пиков бензола и толуола составили соответственно 54 и 68 мм <sup>2</sup> . Рассчитайте содержание остаточного бензола в продукте, масс. %
22.	Гексан, гептан и 2,4-диметилпентан имеют времена удерживания 348, 450 и 390 с соответственно. Мертвое время удерживания в данных условиях составляет 87 с. Рассчитайте индекс удерживания для 2,4-диметилпентана.
23.	На хроматограмме обнаружены пики о-ксилола, 1-этил-2-метилбензола, 1-изопропил-3-метилбензола, а также кумола. Высота пиков равна соответственно 128, 253, 27 и 58 мм. Ширина пиков на половине высоты 2.4, 5.8, 2.7 и 4.9 мм соответственно. Рассчитать процентное содержание компонентов в смеси.
24.	Времена удерживания пентана, изо-бутанола и гексана соответственно равны 54, 67 и 89 с. Рассчитать индекс Ковача для изо-бутанола.
25.	Расстояние от момента ввода пробы до выхода несорбирующегося компонента составляет 3 мм, до выхода бензола 26 мм, до выхода толуола 48 мм. Ширина пиков бензола и толуола у основания составляет соответственно 4 и 8 мм. Длина колонки 1,5 м. Вычислить высоту, эквивалентную теоретической тарелке.
26.	При анализе смеси газов был обнаружен 2-метилпентан. Площадь его пика на хроматограмме составила 132 мм <sup>2</sup> . В смесь был добавлен гексан в качестве вещества-стандарта с концентрацией 10 мг/л. Площадь пика гексана составила 126 мм <sup>2</sup> . Рассчитать концентрацию 2-метилпентана в пробе, учитывая, что его $K_i$ (поправочный коэффициент к чувствительности детектора) будет равен 1.13.
27.	На газовом хроматографе с ПИД с использованием метода внутреннего стандарта в крови был определен этанол. Рассчитайте его массовую концентрацию. В качестве внутреннего стандарта использовали метилэтилкетон. Величину отношения $i$ к $s$

№ п/п	Задачи к зачету
	(поправочный коэффициент К) определили анализом модельной смеси этанола и метилэтилкетона одинаковой концентрации, 2 мг/мл. $Q_i = 401 \text{ мм}^2$ , $Q_{st} = 859 \text{ мм}^2$ . Анализом крови получены следующие результаты: $V = 1 \text{ мл}$ (пробы и стандарта), $C_{st} = 1,014 \text{ мг/мл}$ , $Q_i = 425 \text{ мм}^2$ , $Q_{st} = 615 \text{ мм}^2$
28.	При анализе смеси газов был обнаружен 2-метилбутан. Площадь его пика на хроматограмме составила $219 \text{ мм}^2$ . В смесь был добавлен гексан в качестве вещества-стандарта с концентрацией 10 мг/л. Площадь пика гексана составила $126 \text{ мм}^2$ . Рассчитать концентрацию компонента в пробе, учитывая, что его $K_i$ (поправочный коэффициент к чувствительности детектора) будет равен 1.32.
29.	При анализе смеси газов был обнаружен метиламин. Площадь его пика на хроматограмме составила $84 \text{ мм}^2$ . В смесь был добавлен гексан в качестве вещества-стандарта с концентрацией 10 мг/л. Площадь пика гексана составила $126 \text{ мм}^2$ . Рассчитать концентрацию компонента в пробе, учитывая, что его $K_i$ (поправочный коэффициент к чувствительности детектора) будет равен 1.26.
30.	К 10 мл анализируемой смеси было добавлено вещество-стандарт н-бутанол в количестве 1 мл с концентрацией 20 мг/л. На хроматограмме полученной смеси были обнаружены пики изо-пропанола, н-бутанола, изо-пентанола, пропилацетата и метилметакрилата, имеющих площадь 92, 48, 15, 22 и 34 мм <sup>2</sup> соответственно. $f_i$ будет равен 0.87, 1.04, 1.17 и 1.22 для изо-пропанола, изо-пентанола, пропилацетата и метилметакрилата соответственно. Найти концентрацию компонентов в смеси.

### 7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
8	Зачет (устно)	«зачтено»	Студент отвечает на 6 и более вопросов из 10, заданных преподавателем
		«не зачтено»	Студент отвечает менее, чем на 6 вопросов из 10, заданных преподавателем

## 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	Зенкевич И. Г., Ермаков С. С., Карцова Л. А. и др.	Аналитическая химия. Химический анализ – Изд. 2- е, стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2022. – 443 с.: ил.– ISBN 978-5-8114-9169-8.	Учебник	2022	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/book/187755">https://e.lanbook.com/book/187755</a>
2	Булатов М. И., Ганеев А. А., Дробышев А. И. и др.	Аналитическая химия. Методы идентификации и определения веществ – Изд. 4-е, стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2022. – 584 с. : ил. – ISBN 978-5-8114-9165-0.	Учебник	2022	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/book/187743">https://e.lanbook.com/book/187743</a>
3	Ганеев А. А., Зенкевич И. Г., Карцова Л. А. и др.	Аналитическая химия. Методы разделения веществ и гибридные методы анализа – Изд. 3-е, стер. – Санкт-Петербург : Лань, 2022. – 332 с.: ил.– ISBN 978-5-8114-9137-7.	Учебник	2022	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/book/187643">https://e.lanbook.com/book/187643</a>
4	Вершинин В. И., Власова И. В., Никифорова И. А..	Аналитическая химия : – Изд. 4-е, стер. – Санкт- Петербург: Лань, 2022. – 428	Учебник	2022	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/book/187750">https://e.lanbook.com/book/187750</a>

		с.: ил. — ISBN 978-5-8114-9166-7.			
5	Жебентяев А.И.	Аналитическая химия. Химические методы анализа : учебное пособие / А. И. Жебентяев, А. К. Жерносек, И. Е. Талуть. – 2-е изд., стер. – Минск : Новое знание ; Москва : ИНФРА-М, 2023. – 542 с. : ил. – (Высшее образование. Бакалавриат). – ISBN 978-5-16-004685-3.	Учебное пособие	2023	ЭБС «ZNANIUM.COM» <a href="https://znanium.com/catalog/product/1940916">https://znanium.com/catalog/product/1940916</a>
6	Жебентяев А.И.	Аналитическая химия. Хроматографические методы анализа : учебное пособие / А. И. Жебентяев. – Москва : ИНФРА-М, 2021. – 206 с. : ил. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-16-006615-8.	Учебное пособие	2021	ЭБС «ZNANIUM.COM» <a href="https://znanium.com/catalog/product/1915980">https://znanium.com/catalog/product/1915980</a>
7	Смагунова А. Н., Пашкова Г. В., Белых Л. И..	Математическое планирование эксперимента в методических исследованиях аналитической химии: Изд. 4-е, стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2022. – 120 с. : ил. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN 978-5-8114-9176-6.	Учебное пособие	2022	ЭБС «Лань» <a href="https://e.lanbook.com/book/187782">https://e.lanbook.com/book/187782</a>

## 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	Мовчан Н. И., Романова Р. Г., Горбунова Т. С. и др.	Аналитическая химия: Москва : ИНФРА-М, 2022. – 394 с. – (Высшее образование. Бакалавриат). – ISBN 978-5-16-100051-9 .	Учебник	2022	ЭБС «ZNANIUM» <a href="https://znanium.com/catalog/product/1693697">https://znanium.com/catalog/product/1693697</a>
2	Валова (Копылова), В. Д., Паршина Е. И.	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа: практикум / Валова (Копылова), В. Д.,– 5-е изд., стер. – Москва: Дашков и К°, 2023. – 198 с. : ил. - ISBN 978-5-394-05402-0	Практикум	2023	ЭБС «ZNANIUM» <a href="https://znanium.com/catalog/product/2082446">https://znanium.com/catalog/product/2082446</a>
3	Перегончая О. В., Соколова С. А.	Практикум по аналитической химии. Физико-химические методы анализа:. Воронеж. гос. аграр. ун-т им. Императора Петра I. – Воронеж: ВГАУ им. Петра I, 2017. – 100 с. – URL:	Учебное пособие	2017	ЭБС IPRbooks <a href="http://www.iprbookshop.ru/72731.html">http://www.iprbookshop.ru/72731.html</a>
4	Жебентяев А. И.	Аналитическая химия. Химические методы анализа: 2-е изд., стер. – Минск: Новое знание ; Москва : ИНФРА-М, 2023. – 542 с. : ил. – (Высшее образование. Бакалавриат). – ISBN 978-5-16-004685-3.	Учебное пособие	2023	ЭБС "ZNANIUM.COM" <a href="https://znanium.com/catalog/product/1940916">https://znanium.com/catalog/product/1940916</a>
5	Лебедев А. Т.	Масс-спектрометрия в органической химии – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва :	Учебное пособие	2015	1

<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>
		Техносфера, 2015. – 703 с. : ил. – (Мир химии). – Прил.: с. 617-637, с. 705-730. – Библиогр.: с. 638-681. – ISBN 978-594836-409-4			
6	Лебедев А. Т.	Основы масс-спектрометрии белков и пептидов: Москва: Техносфера, 2012. – 180 с. : ил. – ISBN 978-5-94836-334-9.	Учебное пособие	2012	ЭБС IPRbooks <a href="http://www.iprbookshop.ru/26898.html">http://www.iprbookshop.ru/26898.html</a>
7	Лебедев, А. Т.	Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды: [монография] /Москва : Техносфера, 2013. – 632 с. – (Мир химии) – ISBN 978-5-94836-363-9.	Монография	2013	ЭБС IPRbooks <a href="http://www.iprbookshop.ru/31868.html">http://www.iprbookshop.ru/31868.html</a>



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

- Web of Science [Электронный ресурс]: мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016 – Режим доступа: apps.webofknowledge.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus [Электронный ресурс]: реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004 – Режим доступа: scopus.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary [Электронный ресурс]: научная электронная библиотека. – Москва: НЭБ, 2000. – Режим доступа: elibrary.ru. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink [Электронный ресурс]: [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842. – Режим доступа: link.springer.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect [Электронный ресурс]: коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018. – Режим доступа: sciencedirect.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ЭБС «IPRbooks» (права принадлежат ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа»), договор № 620 от 15.06.2021 г. с 01.08.2021 по 01.08.2022 (по адресу <http://www.iprbookshop.ru>) – содержит учебники и учебные пособия, монографии, производственно–практические, справочные издания, а также деловую литературу для практикующих специалистов. В ЭБС включены издания за последние 5 лет по гуманитарным, социальным и экономическим наукам, по остальным отраслям знания – за последние 10 лет.

### 8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows: WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно; контракт № 1653 от 14.12.2018, срок действия – бессрочно
2	Office Standard: Office Stdandard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition	договор № 690 от 19.05.2015, 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	«БОЛЬШАЯ ХИМИЧЕСКАЯ АУДИТОРИЯ» 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-125	Столбы ученические трехместные моноблоки, стол преподавательский, стул преподавательский, кафедра, доска меловая, экран навесной, проектор., процессор, мышь комп., пульт.
2	Лаборатория «Аналитической химии и физико-химических методов анализа» Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. А-207	Столбы лабораторные островные, полки для посуды, столы лабораторные с полкой аквадистиллятор ДЭ-10, мойка нержавеющая, печь муфельная, сушильный шкаф Snol58/350, мойки лабораторная, шкаф вытяжной, стол письменный, тумбы для посуды и реактивов, центрифуга лабораторная ОПи-3, аналитические весы ВЛР-200, весы лабораторные НСВ123, фотометр фотоэлектрический КФК, рН-метр-иономер рН-121, иономер Эксперт001, иономер И-160М, кондуктометр Анион, табуреты лабораторные, химическая посуда.
3	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. 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 УЛК-203	Переносной проектор, столы компьютерные, стол преподавательский, стулья, доска аудиторная (маркерная), компьютеры с выходом в сеть Интернет.
4	Помещение для самостоятельной работы обучающихся Г-401	Столбы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет.