

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Щёкина Вера Викторовна

Должность: Ректор

Дата подписания: 11.01.2021 10:25:08

Уникальный программный идентификатор:

a2232a55157e576551a5b779a1198892a153989420420336ffb573a434e51021



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ФГБОУ ВПО «Благовещенский государственный педагогический университет»

**ПРОГРАММА АСПИРАНТУРЫ**

**Рабочая программа дисциплины**



Утверждаю  
Проректор по НР  
Т.Д. Каргина  
4 июня 2015 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ  
ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ  
(с изменениями и дополнениями 2015 г.)**

**Направление подготовки  
04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**

**Направленность (профиль)  
ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Квалификация выпускника - Исследователь. Преподаватель-исследователь

**Принята на заседании кафедры химии  
(протокол № 1 от «17» сентября 2014 г.)**

**Принята  
на заседании Учёного совета  
естественно-географического факультета  
(протокол № 2 от 22.10. 2014 г.)**

**Благовещенск 2015**

## СОДЕРЖАНИЕ

|                                                                                  | стр. |
|----------------------------------------------------------------------------------|------|
| 1 Пояснительная записка.....                                                     | 3    |
| 2 Учебно-тематический план.....                                                  | 4    |
| 3 Содержание разделов (тем).....                                                 | 5    |
| 4 Методические рекомендации (указания) аспирантам по изучению дисциплины.....    | 6    |
| 5 Практикум по дисциплине.....                                                   | 7    |
| 6 Дидактические материалы для контроля (самоконтроля) усвоенного материала ..... | 7    |
| 7 Перечень информационных технологий, используемых в процессе обучения..         | 23   |
| 8 Список литературы и информационных ресурсов.....                               | 23   |
| 9 Материально-техническая база.....                                              | 24   |
| 10 Лист изменений и дополнений.....                                              | 25   |

## 1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

**Цель дисциплины.** Изучение основ современных методов исследования элементоорганических соединений для получения детальной информации об их строении и свойствах, а также особенностей и потенциальных возможностей каждого метода.

**Место дисциплины в структуре образовательной программы.**

Дисциплина «Физические методы исследования элементоорганических соединений» относится к вариативной части дисциплин (модулей) Блока 1.

Курс предполагает наличие у аспирантов знаний по химии в объеме программы высшего профессионального образования.

**Требования к результатам освоения содержания дисциплины.**

Дисциплина направлена на формирование компетенций УК-1, ОПК-1, ПК-1 и результатов обучения, представленных в таблице.

| Формируемые компетенции                                                                                                                                                                                                                                                                | Планируемые результаты обучения                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| УК-1: способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.                                                                               | знать:<br>методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (З (УК-1)-1);<br>уметь:<br>при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений (У (УК-1)-2);<br>владеть:<br>навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (В (УК-1)-2); |
| ОПК-1: способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.                                                         | знать:<br>современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности (З (ОПК-1)-1);<br>уметь:<br>выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования (У (ОПК-1)-1);<br>владеть:<br>навыками планирования научного исследования, анализа полученных результатов и формулировки выводов (В (ОПК-1)-2);                                                                                                                                                                                                                       |
| ПК-1: способность к самостоятельному проведению научных исследований и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (профилю) Химия элементоорганических соединений. | знать:<br>современное состояние науки в области химии элементоорганических соединений (З (ПК-1)-1);<br>уметь:<br>представлять результаты научных исследований (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу (У (ПК-1)-3);<br>владеть:<br>методами планирования, подготовки, проведения научных исследований, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (профилю) Химия элементоорганических соединений (В (ПК-1)-1).                                                                                                                                                          |

## Содержание и структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.

### ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

| Вид учебной работы      | Всего часов | Семестры |
|-------------------------|-------------|----------|
| Общая трудоемкость      | 72          | 4        |
| Аудиторные занятия      | 36          |          |
| Лекции                  | 22          |          |
| Лабораторные работы     | 8           |          |
| Самостоятельная работа  | 36          |          |
| Вид итогового контроля: |             | зачет    |

## 2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

| № раз-дела | Наименование раздела                                                                                                                                                                                                        | Количество часов |                   |          |          |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|-------------------|----------|----------|
|            |                                                                                                                                                                                                                             | Всего            | Аудиторная работа |          | СР       |
|            |                                                                                                                                                                                                                             |                  | ЛК                | ПР       |          |
| <b>1</b>   | <b>Введение.</b>                                                                                                                                                                                                            | <b>8</b>         | <b>4</b>          |          | <b>4</b> |
|            | Значение физических методов исследования в химии элементоорганических соединений.                                                                                                                                           | 8                | 4                 |          | 4        |
| <b>2</b>   | <b>УФ-спектроскопия.</b>                                                                                                                                                                                                    | <b>8</b>         | <b>4</b>          |          | <b>4</b> |
|            | Исследование элементоорганических соединений с помощью УФ-спектроскопии: изучение структуры, взаимодействие хромофоров, стерические эффекты, водородная связь.                                                              | 8                | 4                 |          | 4        |
| <b>3</b>   | <b>ИК-спектроскопия.</b>                                                                                                                                                                                                    | <b>16</b>        | <b>4</b>          | <b>4</b> | <b>8</b> |
|            | Основные области ИК спектра. Особенности инфракрасных спектров важнейших классов органических соединений. Факторы, влияющие на ИК спектр: водородная связь, стерические эффекты, эффект масс, изотопный эффект, сопряжение. | 8                | 4                 |          | 4        |
|            | Исследование ИК-спектроскопией арильных соединений висмута.                                                                                                                                                                 | 4                |                   | 2        | 2        |
|            | Исследование ИК-спектроскопией сурьмаорганических комплексов.                                                                                                                                                               | 4                |                   | 2        | 2        |
| <b>4</b>   | <b>Спектроскопия ЭПР.</b>                                                                                                                                                                                                   | <b>8</b>         | <b>4</b>          |          | <b>4</b> |
|            | Сущность метода ЭПР (условие ЭПР, g-фактор, природа СТС, ДСТС, число компонент мультиплета, распределение интенсивности).                                                                                                   | 8                | 4                 |          | 4        |
| <b>5</b>   | <b>Спектроскопия ЯМР.</b>                                                                                                                                                                                                   | <b>12</b>        | <b>4</b>          | <b>2</b> | <b>6</b> |
|            | Сущность метода ЯМР, возможности, особенности, ограничения. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов ЯМР. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР.                                                           | 6                | 4                 |          | 2        |
|            | Интерпретация спектров ЯМР комплексов элементоорганических соединений.                                                                                                                                                      | 6                |                   | 2        | 4        |
| <b>6</b>   | <b>Масс-спектрометрия.</b>                                                                                                                                                                                                  | <b>8</b>         | <b>4</b>          |          | <b>4</b> |
|            | Особенности регистрации масс-спектров. Общий вид масс-спектра. Масс-спектры вы-                                                                                                                                             | 8                | 4                 |          | 4        |

|   |                                                                                |           |           |          |           |
|---|--------------------------------------------------------------------------------|-----------|-----------|----------|-----------|
|   | сокого разрешения.                                                             |           |           |          |           |
| 7 | <b>Дифракционные методы.</b>                                                   | <b>12</b> | <b>4</b>  | <b>2</b> | <b>6</b>  |
|   | Дифракция рентгеновских лучей, дифракция электронов, дифракция нейтронов.      |           |           |          |           |
|   | Интерпретация данных рентгеноструктурного анализа диароксидов трифенилвисмута. |           |           | 2        |           |
|   | <b>Итого</b>                                                                   | <b>72</b> | <b>28</b> | <b>8</b> | <b>36</b> |

Реализация компетентностного подхода предусматривает широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (компьютерные симуляции, разбор конкретных ситуаций, групповые дискуссии и выступления на научных семинарах кафедры по результатам научно-исследовательской работы, лекция-дискуссия, лекция-консультация, круглые столы, работа в малых группах, case-study (анализ конкретных, практических ситуаций), учебные групповые дискуссии).

### 3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ)

#### 1 Введение

Место физических методов в органической химии. Особенности спектральных методов и их положение на шкале электромагнитного спектра. Характер состояний и диапазон частот.

#### 2 УФ-спектроскопия

Вид и положение полос поглощения, типы электронных переходов, природа поглощения света. Законы поглощения света веществом, ограничения. Образцы. Влияние растворителя и температуры на вид полос поглощения. Способы изображения спектров, терминология. Хромофоры и ауксохромы. Поглощение насыщенных соединений и изолированных хромофоров. Поглощение ненасыщенных соединений и сопряженных хромофоров. Поглощение ароматических соединений, влияние заместителей, конденсированных ядер. Поглощение гетероароматических соединений. Исследование органических соединений с помощью УФ-спектроскопии: изучение структуры, взаимодействие хромофоров, стерические эффекты, водородная связь. Применение в химии ЭОС: установление строения молекул, изучение динамики молекул, измерение концентрации. Применение симметрии при интерпретации экспериментальных спектров.

#### 3 ИК-спектроскопия

Типы частот поглощения. Условия характеристичности частот. Типы колебаний и интенсивность полос поглощения. Зависимость частоты колебания от массы атомов и кратности связи. Основные области ИК спектра. Особенности инфракрасных спектров важнейших классов органических соединений. Характеристические частоты основных функциональных групп: ОН, NO<sub>2</sub>, CN, Hal и др. Поглощение соединений с С=О группой, поглощение амидов и аминов. Факторы, влияющие на ИК спектр: водородная связь, стерические эффекты, эффект масс, изотопный эффект, сопряжение. Применение в химии ЭОС: установление строения молекул, изучение динамики молекул, измерение концентрации. Применение симметрии при интерпретации экспериментальных спектров.

#### 4 Спектроскопия ЭПР

Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. g-Фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности. Константа СТС, ДСТС. Тонкое расщепление. Ширина линий. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Химическая поляризация электронов. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Блок-схема спектрометра ЭПР, особенности эксперимента, достоинства и ограничения метода. Применение в химии ЭОС: установление строения радикалов, изучение динамики молекул и механизмов радикальных реакций.

#### 5 Спектроскопия ЯМР

Сущность метода ЯМР, возможности, особенности, ограничения. Спин ядра, ориентация ядерного спина в магнитном поле. Условие резонанса и его экспериментальное обнаружение.

Константа экранирования, абсолютный и относительный химический сдвиги. Эталоны, раз-  
вертка по полю и по частоте. Зависимость химического сдвига от  $H_0$ . Влияние на химический  
сдвиг гибридизации атома углерода и электронных эффектов заместителей, температуры, кон-  
центрации, кислотности среды, растворителя. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплет-  
ность сигналов ЯМР. КССВ: прямые, геминальные, вицинальные и дальние константы, их знак  
и свойства. Спиновые системы, спектры первого и высших порядков. Ядерный эффект  
Оверхаузера. Способы упрощения спектров, двойной резонанс, подавление спин-спинового  
взаимодействия. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР. Области применения в химии  
ЭОС: изучение строения и динамики молекул, определение примесей.

## **6 Масс-спектрометрия**

Особенности регистрации масс-спектров. Образование молекулярного иона и его фраг-  
ментация. Основные закономерности фрагментации органических молекул при электронном  
ударе и химической ионизации. Молекулярные, изотопные и метастабильные пики. Общий вид  
масс-спектра. Анализ области молекулярного иона. Масс-спектры высокого разрешения. Обла-  
сти применения в химии ЭОС: установление состава и строения молекул, качественный и коли-  
чественный анализ смесей (хроматомасс-спектрометрия), определение микропримесей, изо-  
топный анализ, измерение термодинамических параметров (энергии ионизации молекул, энергии  
появления ионов, энергии диссоциации связей), изучение ионно-молекулярных реакций, газо-  
фазная кислотность и основность молекул.

## **7 Дифракционные методы**

Общие особенности дифракции. Условие Вульфа-Брэгга. Дифракция рентгеновских лу-  
чей. Рентгеновская кристаллография. Рентгеноструктурный анализ (Метод Лауэ, порошка, вра-  
щения, качания, четырехкружный дифрактометр) Возможности и ограничения методов. Ди-  
фракция нейтронов. Достоинства и недостатки метода. Дифракция электронов. Электроногра-  
фический метод. Интерпретация дифракционной картины. Атомные амплитуды рассеяния для  
различных микрочастиц. Области применения в химии ЭОС: установление строения молекул и  
кристаллов, исследование природы химических связей.

## **4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) АСПИРАНТАМ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа дисциплины «Физические методы исследования элементоорганиче-  
ских соединений» предназначена для самостоятельной работы аспирантов.

Рабочая программа дисциплины включает: учебно-тематический план; содержание разде-  
лов (тем); практикум; дидактические материалы (ФОС) для контроля (самоконтроля) усвоенно-  
го материала; список литературы, в том числе интернет-ресурсы.

Рабочая программа призвана помочь аспирантам в организации самостоятельной работы  
по освоению дисциплины «Физические методы исследования элементоорганических соедине-  
ний».

Рекомендации:

- перед очередной лекцией необходимо просмотреть по конспекту материал предыдущей лекции. При затруднениях в восприятии материала надо обратиться к основным литературным источникам. Если разобраться в материале опять не удалось, обратитесь к преподавателю по графику его консультаций или на практических занятиях;

- обратить особое внимание на физическую сущность и графическое сопровождение ос-  
новных рассматриваемых теоретических положений.

- на занятия носить рекомендованную преподавателем литературу;

- до очередного занятия по конспекту (или литературе) проработать теоретический мате-  
риал, соответствующий теме занятия;

- в начале занятий задать преподавателю вопросы по материалу, вызвавшему затруднения  
в его понимании и освоении при решении задач, заданных для самостоятельного решения;

- иметь при себе конспект лекций.

## 5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

| № | Темы                                                                                                  | Вид занятий         | Кол-во часов |
|---|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|--------------|
| 1 | Исследование ИК-спектроскопией арильных соединений висмута.                                           | Лабораторная работа | 2            |
| 2 | Исследование ИК-спектроскопией сурьмаорганических комплексов.                                         | Лабораторная работа | 2            |
| 3 | Интерпретация спектров ЯМР комплексов элементоорганических соединений.                                | Лабораторная работа | 2            |
| 4 | Получение кристаллов и интерпретация данных рентгеноструктурного анализа диароксидов трифенилвисмута. | Лабораторная работа | 2            |
|   | <b>Итого</b>                                                                                          |                     | <b>8</b>     |

## 6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА

### 6.1 Паспорт фонда оценочных средств

| № п/п | Контролируемые разделы (темы) дисциплины                        | Код контролируемой компетенции (или ее части) | Наименование оценочного средства   |
|-------|-----------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|------------------------------------|
| 1     | Введение. Значение физических методов исследования в химии ЭОС. | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4       |
| 2     | УФ-спектроскопия.                                               | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4       |
| 3     | ИК-спектроскопия.                                               | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4, ТС-3 |
| 4     | Спектроскопия ЭПР.                                              | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4       |
| 5     | Спектроскопия ЯМР.                                              | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4       |
| 6     | Масс-спектрометрия.                                             | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4       |
| 7     | Дифракционные методы.                                           | УК-1,ОПК-1, ПК-1                              | УО-1, УО-3, ПР-1, ПР-2, ПР-4, ТС-3 |

### Наименование оценочного средства

Устный опрос (УО): собеседование (УО-1), коллоквиум (УО-2), зачет (УО-3), экзамен по дисциплине, модулю (УО-4), итоговый государственный экзамен (УО-5).

Письменные работы (ПР): тесты (ПР-1), контрольные работы (ПР-2), эссе (ПР-3), рефераты (ПР-4), курсовые работы (ПР-5), научно-учебные отчеты по практикам (ПР-6), отчеты по научно-исследовательской работе аспирантов (НИРС) (ПР-7).

Технические средства контроля (ТС): программы компьютерного тестирования (ТС-1), практические задачи (ТС-2), комплексные ситуационные задания (ТС-3).

Информационные системы и технологии (ИС): обучающие тесты (ИС-1), электронные аттестующие тесты (ИС-2), электронный практикум (ИС-3), виртуальные лабораторные работы (ИС-4) и др.

Шифр и название КОМПЕТЕНЦИИ:

**УК-1 Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях**

#### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Тип КОМПЕТЕНЦИИ:

**Универсальная** компетенция выпускника программы аспирантуры.

#### ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы аспирантуры, должен:

- знать: основные методы научно-исследовательской деятельности;
- уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника; избегать автоматического применения стандартных формул и приемов при решении задач;
- владеть: навыками сбора, обработки, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач исследования.

#### ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (УК-1) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

| Планируемые результаты обучения<br>(показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)                                                                                                                 | Критерии оценивания результатов обучения |                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                   |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                                                                                  | 1                                        | 2                                                                                                                                                                                       | 3                                                                                                                                                                                                        | 4                                                                                                                                                                                                              | 5                                                                                                                                                                                                 |
| знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях | Отсутствие знаний.                       | Фрагментарные знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач. | Общие, но не структурированные знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач. | Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основных методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и | Сформированные систематические знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических |

|                                                                                                                                                                                                                            |                     |                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                             |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| плинарных областях.<br>Шифр: 3 (УК-1)-1                                                                                                                                                                                    |                     |                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                             | практических задач, в том числе междисциплинарных.                                                                                                                                                                 | ских задач, в том числе междисциплинарных.                                                                                                                                                  |
| уметь: при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений.<br>Шифр: У (УК-1)-2                                            | Отсутствие умений.  | Частично освоенное умение при решении исследовательских и практических задач генерировать идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений.       | В целом успешное, но не систематически осуществляемое умение при решении исследовательских и практических задач генерировать идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений. | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение при решении исследовательских и практических задач генерировать идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений.            | Сформированное умение при решении исследовательских и практических задач генерировать идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений.                        |
| владеть: навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.<br>Шифр: В (УК-1)-2 | Отсутствие навыков. | Фрагментарное применение технологий критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач. | В целом успешное, но не систематическое применение технологий критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач.    | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение технологий критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач. | Успешное и систематическое применение технологий критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач. |

Шифр и название КОМПЕТЕНЦИИ:

**ОПК-1: способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий**

#### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Тип КОМПЕТЕНЦИИ:

**Общепрофессиональная** компетенция выпускника программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки.

## ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы аспирантуры должен:

- знать: цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов;
- уметь: составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять полученные результаты;
- владеть: систематическими знаниями по направлению деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме.

### ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (ОПК-1) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

| Планируемые результаты обучения<br>(показатели достижения заданного уровня освоения компетенций), шифр                                                | Критерии оценивания результатов обучения |                                                                                                                                            |                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                             |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                       | 1                                        | 2                                                                                                                                          | 3                                                                                                                                                                    | 4                                                                                                                                                                               | 5                                                                                                                                           |
| <p>знать:<br/>современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.</p> <p>Шифр 3 (ОПК-1)-1</p> | Отсутствие знаний.                       | Фрагментарные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. | В целом успешные, но не систематические представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. | В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. | Сформированные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности. |
| <p>уметь:<br/>выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-</p>                                                  | Отсутствие умений.                       | Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и рас-                                                        | В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспери-                                                                        | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать эксперимен-                                                                      | Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические                                                    |

|                                                                                                                                   |                     |                                                                                                                             |                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                          |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| теоретические методы исследования.<br>Шифр: У (ОПК-1)-1                                                                           |                     | четно-теоретические методы для решения научной задачи.                                                                      | ментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.                                                                                | тальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.                                                                                             | методы для решения научной задачи.                                                                                                       |
| владеть: навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов.<br>Шифр: В (ОПК-1)-2 | Отсутствие навыков. | Фрагментарное применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. | В целом успешное, но не систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. | Успешное и систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. |

Шифр и название КОМПЕТЕНЦИИ:

**ПК-1: Способность к самостоятельному проведению научных исследований и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (профилю) Химия элементоорганических соединений**

#### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Профессиональная компетенция выпускника программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки

#### ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВЕНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы аспирантуры, должен:

- знать: фундаментальные основы химии элементоорганических соединений и специальных дисциплин;
- уметь: составлять план работы по заданной теме, анализировать получаемые результаты, составлять отчеты о научно-исследовательской работе;
- владеть: синтетическими и физико-химическими методами исследований в области химии элементоорганических соединений.

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (ПК-1) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ**

| <b>Планируемые результаты обучения</b><br>(показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)                                                     | <b>Критерии оценивания результатов обучения</b> |                                                                                                            |                                                                                                                                   |                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                       |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                             | 1                                               | 2                                                                                                          | 3                                                                                                                                 | 4                                                                                                                                             | 5                                                                                                                                                                                                                                     |
| <p>знать:<br/>современное состояние науки в области химии элементоорганических соединений.</p> <p>Шифр 3 (ПК-1)-1</p>                                       | Отсутствие знаний.                              | Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области химии элементоорганических соединений. | Неполные представления о современном состоянии науки в области химии элементоорганических соединений.                             | Сформированные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современном состоянии науки в области химии элементоорганических соединений. | Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в области химии элементоорганических соединений.                                                                                                           |
| <p>уметь:<br/>представлять результаты научных исследований (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу.</p> <p>Шифр: У (ПК-1)-3</p> | Отсутствие умений.                              | Умение представлять результаты научных исследований узкому кругу специалистов.                             | В целом успешное, умение представлять результаты научных исследований (в т.ч., диссертационной работы) академическому сообществу. | Успешное умение представлять результаты научных исследований (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу.             | Сформированное умение представлять результаты научных исследований (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу; определять целевые группы и форматы продвижения результатов собственной научной деятельности. |
| <p>владеть:<br/>методами планирования, подготовки, проведения научных исследований, анализа полученных дан-</p>                                             | Отсутствие навыков.                             | Фрагментарное применение методов планирования, подготовки и проведения научных исследований,               | В целом успешное, но не систематическое применение методов планирования, подготовки, проведения                                   | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение методов планирования, подготовки,                                                | Успешное и систематическое применение методов планирования, подготовки и проведения научных исследо-                                                                                                                                  |

|                                                                                                             |  |                                         |                                                  |                                                                                                                       |                                                                                                                                 |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|-----------------------------------------|--------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (профилю) Химия элементоорганических соединений. |  | анализа и обсуждения полученных данных. | научных исследований, анализа полученных данных. | проведения научных исследований, анализа полученных данных, формулировка выводов по результатам научных исследований. | ваний и анализа и обсуждения экспериментальных данных; формулировка выводов и рекомендаций по результатам научных исследований. |
| Шифр В (ПК-1)-1                                                                                             |  |                                         |                                                  |                                                                                                                       |                                                                                                                                 |

## 6.2 Примеры контрольных заданий

### Критерии оценивания:

оценка «отлично» выставляется аспиранту, если работа выполнена без ошибок, указаны все расчетные формулы, единицы измерения, без ошибок выполнены математические расчеты;

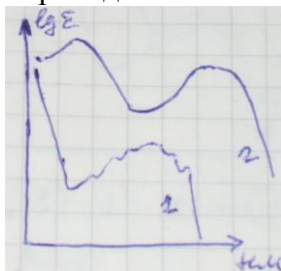
оценка «хорошо» если аспирант выполнил работу полностью, но допустил в ней: не более одной негрубой ошибки и одного недочета или не более двух недочетов;

оценка «удовлетворительно» если работа выполнена правильно, выполнена не менее половины работы или допущено: не более двух грубых ошибок; или не более одной грубой и одной негрубой ошибки и одного недочета; или не более двух-трех негрубых ошибок; или одной негрубой ошибки и трех недочетов; или при отсутствии ошибок, но при наличии четырех-пяти недочетов.

оценка «неудовлетворительно» допущено число ошибок и недочетов превосходящее норму, при которой может быть выставлена оценка «удовлетворительно».

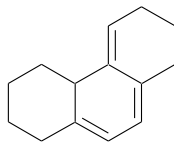
### УФ-спектроскопия

1) Какая из кривых поглощения принадлежит: *m*-толуидину, бензиламину?

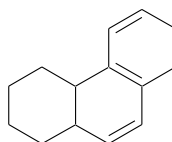


2) Почему у  $\beta$ -нафтола в сравнении с  $\beta$ -нафтилкарбинолом наблюдается bathochromное смещение  $\alpha$ -полосы?

3) Рассчитать для структур 1 и 2 величины  $\lambda_{\max}$  по аддитивной схеме (исходя из  $\lambda_{\max} = 217$  бутадиена).



1



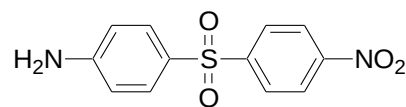
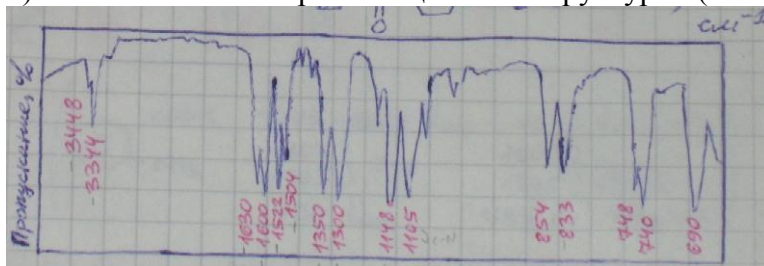
2

### ИК-спектроскопия

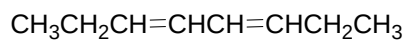
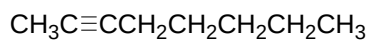
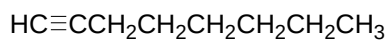
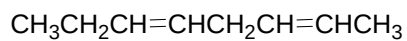
1) Записан спектр поглощения вещества с брутто-формулой  $C_6H_4Cl_2N_2O_2$  в KBr. Определить, в какую функциональную группу входят атомы O и N?



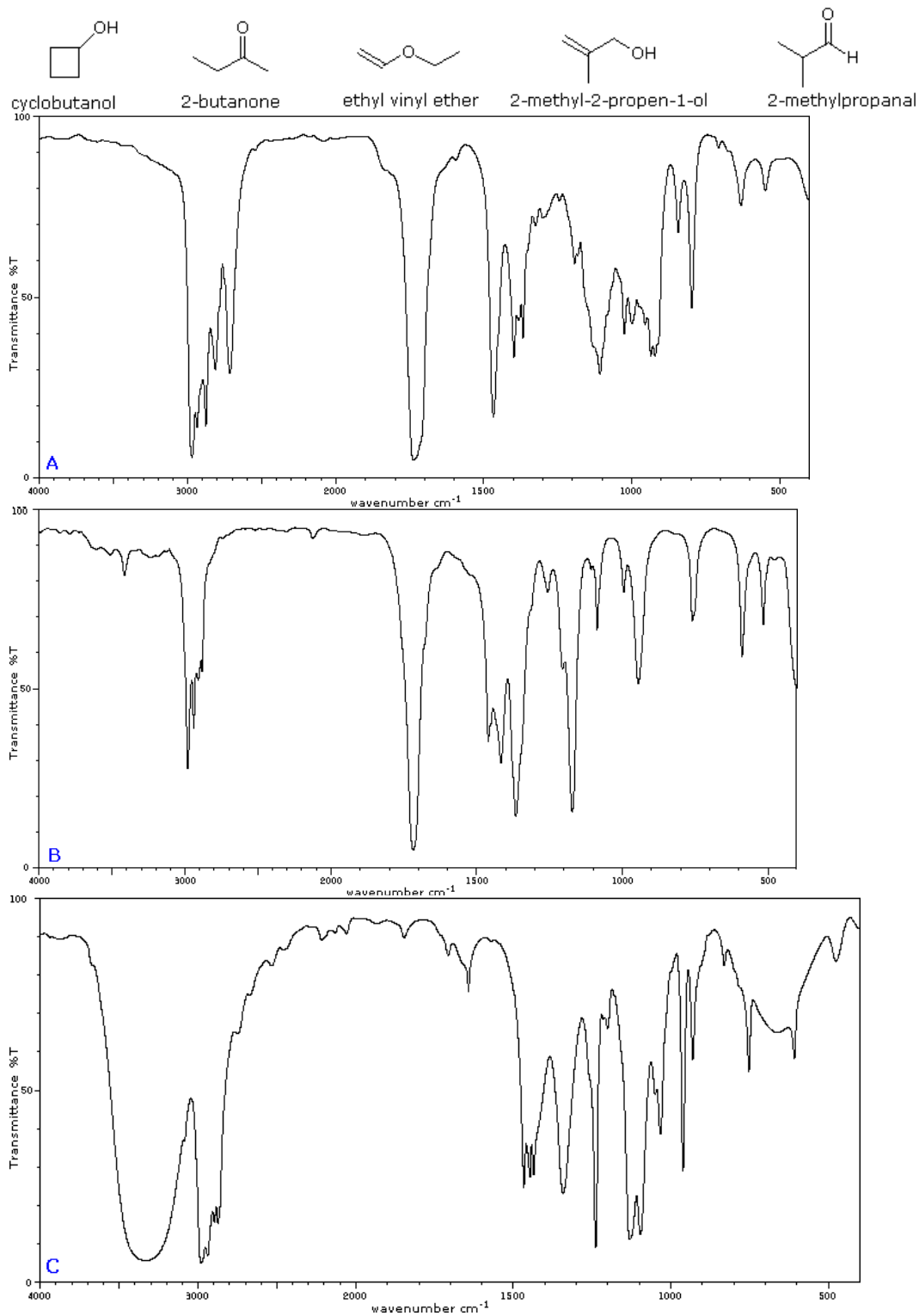
2) Сопоставить спектр поглощения со структурой (запись в KBr):

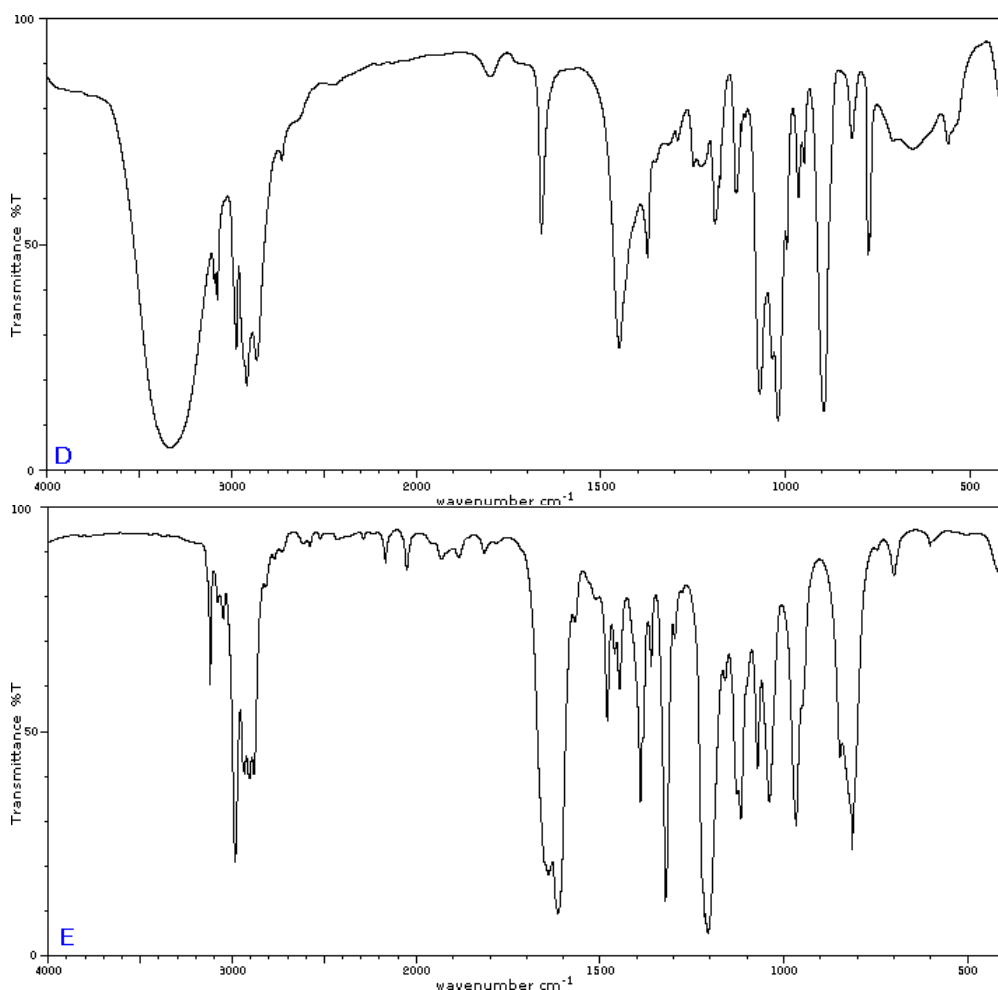


3) В ИК-спектре вещества найдены полосы: 3300, 2950, 2860, 2120, 1465, 1382. Какому соединению соответствует спектр?



4) Соотнесите 5 изомеров с брутто-формулой  $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$  с их ИК-спектрами, приведенными ниже.





### ЯМР-спектроскопия

1) Определить тип спиновой системы: пропан, винилхлорид, 1,2-дихлорбензол, 1,1-дихлорпропан, пиридин, о-бромэтилбензоат, п-нитроанизол.

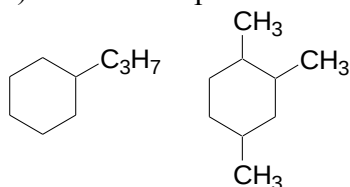
2) Изобразить предполагаемый вид спектра: метилэтиловый эфир, 1-иод-1-хлорэтилен, 1,1-дихлорбутанон-2, дифторэтан, 3-хлорбутанон-2, транс-2-бутеновая кислота.

3) По брутто-формуле и спектру определить структуру соединения: а)  $C_4H_{10}O_2$ , д 1.18, с 3.22, к 4.50; б)  $C_6H_{13}Cl$ , с 1.2, т 2.0, т 3.8; в)  $C_2H_6O_3S$ , с 3.6; г)  $C_3H_7O_2N$ , д 1.4, септет 4.6; д)  $C_6H_5O_3N$ , д 6.4, д 7.5, с 8.4; е)  $C_4H_9Br$ , д 1.0, м 2.0, д 3.3; ж)  $C_3H_6BrI$ , квинт. 1.8, т 3.55, т 3.65; з)  $C_4H_7OCl$ , с 2.2, т 2.9, т 3.7; и)  $C_7H_9N$ , с 2.1, с 3.2, д 6.4, д 6.8; к)  $C_6H_8O$ , с 1.9, с 5.4 – 3:1.

Типовые задачи по масс-спектрометрии:

1) Объяснить происхождение пиков в масс-спектре электронного удара циануксусного эфира  $NC-CH_2-COOEt$ : 113, 86, 68, 45, 40, 29, 27.

2) Как можно различить по масс-спектрам изомеры?

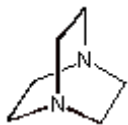
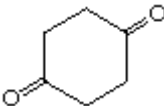
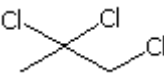
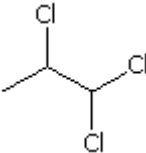
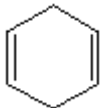
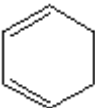
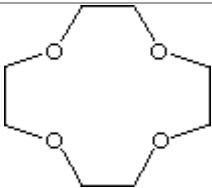
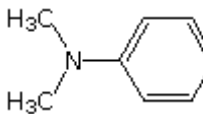
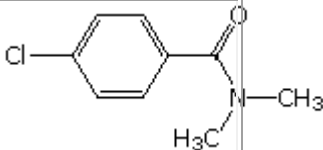


3) Какие изотопные пики будут наблюдаться в области молекулярного иона для:  $C_2H_5BrO$ ,  $C_6H_4BrCl$ ? Допустить, что интенсивность молекулярного пика равна 100 %. Привести возможные структуры этих соединений.

4) Какое из соединений с наибольшей вероятностью в качестве основного пика будет иметь в спектре пик  $m/z = 43$ ?  $CH_3(CH_2)_4CH_3$ ,  $(CH_3)_3CCH_2CH_3$ ,  $(CH_3)_2CHCH(CH_3)_2$ , циклогексан.

5) (комплексная) Какой спектральный метод (УФ, ИК, ЯМР  $^1H$ , масс-спектрометрия) позволит наиболее надёжно различить следующие пары соединений? Допустите, что у вас нет

второго соединения для прямого сравнения их свойств.

|                                                                                     |                                                                                      |
|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
|    |    |
|    |    |
|    |    |
|    |    |
| (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH<br>2-OH                                        | (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-OH                                                 |
| C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> -Cl                                                   | C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> -Br                                                    |
|  |  |

### Пример контрольной работы

#### Тема «Электронный парамагнитный резонанс»

1. Дифференциальный спектр ЭПР вещества представляет собой две линии одинаковой интенсивности с  $g_1 = 1,98$  и  $g_2 = 2,01$ . Как при этом выглядит кривая поглощения?
2. При восстановлении диоксида титана в вакууме получен образец проводимостью 1 См. Каков вид спектра ЭПР ( $g$ -фактор и ширина спектра) этого образца?
3. В природной смеси изотопов ванадия содержится 0,24 %  $^{50}\text{V}$  с ядерным спином 6 и 99,76 %  $^{51}\text{V}$  со спином  $7/2$ . Каков вид спектра ЭПР комплекса  $[\text{V}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ ?
4. В природной смеси изотопов хрома содержатся  $^{50}\text{Cr}$ ,  $^{52}\text{Cr}$ ,  $^{53}\text{Cr}$ ,  $^{54}\text{Cr}$ . Каков вид спектра ЭПР комплекса  $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ ?
5. В природной смеси изотопов меди содержится 69,09 %  $^{63}\text{Cu}$  и 30,91 %  $^{64}\text{Cu}$ . Оба изотопа имеют ядерный спин  $3/2$ . Каков вид спектра ЭПР комплекса  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ ?
6. При температуре жидкого азота парамагнитный центр  $\text{V}^{3+}$  в монокристалле CdS (структура сфалерита) в спектре ЭПР дает синглетную линию с  $g = 1,93$ . Каков вид спектра этого образца при комнатной температуре?
7. Как изменится интенсивность линий в спектре ЭПР, если образец охладить от комнатной температуры до температуры: а) жидкого азота; б) жидкого гелия?
8. Сравните спектры ЭПР одного и того же парамагнитного центра в диамагнитном металле и диамагнитном диэлектрике.
9. Сколько линий следует ожидать в спектре ЭПР  $(\text{CN})_5\text{CoO}_2\text{Co}(\text{NH}_3)_5$ ? Кобальт – моноизотопный элемент ( $^{59}\text{Co}$ ) имеет спин  $7/2$ .
10. Почему  $g$ -факторы для комплексов  $[\text{CrF}_6]^{3-}$  и  $[\text{MnF}_6]^{4-}$  изотропны и близки к 2,0, а для комплекса  $[\text{CoF}_6]^{4-}$   $g$ -факторы анизотропны и отличаются от 2,0?

### Тема «Масс-спектрометрия»

1. В чем заключается принцип масс-спектрометрического метода анализа?
2. Охарактеризуйте основные параметры масс-спектрометров: диапазон массовых чисел, разрешающую способность, порог чувствительности, коэффициент использования пробы.
3. Из каких основных узлов состоит масс-спектрометр?
4. Чем различаются статические и динамические системы масс-спектрометров?
5. Как действует статический магнитный масс-анализатор?
6. Какие процессы происходят при ионизации молекул электронным ударом? Что такое диссоциативная ионизация?
7. Как рассчитать энергию разрыва связи в газообразной молекуле исходя из энергий появления ионов?
8. Каковы основные этапы расшифровки масс-спектра и идентификации молекулярных предшественников ионов?
9. Каковы возможности исследования высокотемпературного пара при объединении масс-спектрометрического метода анализа состава пара и эффузионного метода определения давления пара?
10. Какова связь между интенсивностью ионного тока и парциальным давлением компонента пара в эффузионной камере?
11. Как рассчитывают давление пара методом полного изотермического испарения пробы?
12. Как рассчитывают давление пара методом сравнения ионных токов?
13. Как рассчитывают энтальпию химической реакции из данных масс-спектрометрического эксперимента?
14. Как определить активность компонентов конденсированной фазы из данных масс-спектрометрического эксперимента? Охарактеризуйте метод дифференциальной масс-спектрометрии.
15. Каковы особенности применения масс-спектрометра при исследовании ионно-молекулярных газофазных процессов?
16. Какую дополнительную информацию о высокотемпературных процессах можно получить, объединяя масс-спектрометрию с другими методами исследования?

### 6.3 ПРИМЕРЫ ТЕСТОВЫХ ЗАДАНИЙ

#### Критерии оценивания тестовых заданий:

- «отлично» - при 90-100 % набранных тестовых баллов,  
«хорошо» - 89-80 %,   
«удовлетворительно» - 79-61 %.

#### Итоговый тестовый контроль

##### Инструкция

*Тест состоит из частей А, В, С и содержит 20 заданий, из них 10 заданий – часть А, 5 заданий – часть В, 5 заданий – часть С. На его выполнение отводится 90 минут. Задания рекомендуется выполнять по порядку, не пропуская ни одного, даже самого легкого. Если задание не удастся выполнить сразу, перейдите к следующему. Если останется время, вернитесь к пропущенному заданию. Верно выполненные задания части А оцениваются в 2 балла, части В – 2 балла, части С – 5 баллов.*

#### Часть А

*К каждому заданию части А дано несколько ответов, из которых только один ответ верный. Выберите верный, по Вашему мнению, ответ. В бланке ответов напротив номера задания поставьте номер или букву, которые соответствуют номеру или букве выбранного Вами ответа.*

A1. С помощью каких методов изучается взаимодействие электромагнитного излучения с веществом, приводящее к различным энергетическим переходам:

- а) дифракционных;
- б) оптических;
- в) спектроскопических;
- г) магнитных.

А2. При четных значениях заряда и массового числа ядерный спин принимает значение:

- а)  $I = 3/2$ ;
- б)  $I = 1/2$ ;
- в)  $I = 1$  ;
- г)  $I = 0$ .

А3. Время, за которое система возвращается в исходное состояние, отдав избыток энергии в окружающую среду называется:

- а) время спин-спиновой релаксации;
- б) время спин-решеточной релаксации;
- в) равновесное время;
- г) характеристическое время.

А4. Как на практике определяется величина относительного химического сдвига:

$$\delta = \frac{\nu_{\text{эм}} - \nu_{\text{обр}}}{\nu_{\text{эм}}}$$

- а)  $\delta = \frac{\nu_{\text{эм}} - \nu_{\text{обр}}}{\nu_{\text{эм}}}$  ;

$$\delta = \frac{H_{\text{эм}} - H_{\text{обр}}}{H_{\text{эм}}}$$

- б)  $\delta = \frac{H_{\text{эм}} - H_{\text{обр}}}{H_{\text{эм}}}$  ;
- в)  $\delta = \sigma_{\text{эм}} - \sigma_{\text{обр}}$ .

А5. В процессе ионизации веществ образуются различные ионы. Как называется ион  $\text{Tl}_2^+$ , образованный при ионизации  $\text{Tl}_2\text{O}$ :

- а) молекулярным;
- б) осколочным;
- в) перегруппировочным;
- г) метастабильным.

А6. Сколько линий следует ожидать в спектре ЭПР  $(\text{CN})_5\text{CoO}_2\text{Co}(\text{NH}_3)_5$ ? Кобальт – моноизотопный элемент ( $^{59}\text{Co}$ ) имеет спин  $7/2$ .

- а) 5;
- б) 8;
- в) 1;
- г) 2.

А7. Как называется метод, позволяющий определить дипольный момент газов?

- а) электрический;
- б) первый метод Дебая;
- в) второй метод Дебая;
- г) магнитный метод.

А8. Как называется метрологический параметр прибора, характеризующий способность раздельно регистрировать ионы, близкие по массам:

- а) порог чувствительности;
- б) разрешающая способность;
- в) коэффициент использования пробы;
- г) диапазон массовых чисел.

А9. g-Фактор спектроскопического расщепления (g-фактор Ланде) для свободного электрона принимает значение равное

- а) 2,00232;
- б) 2,0036;
- в) 2,0;
- г) 1,9.

А10. Расщепления линий в спектре ЭПР на несколько линий СТС происходит в резуль-

тате

- а) спин-ядерных взаимодействий;
- б) спин-спиновых взаимодействий;
- в) ядерных взаимодействий.

### Часть В

*Будьте внимательны! Задания части В могут быть 3-х типов:*

- 1) задания, содержащие несколько верных ответов;
- 2) задания на установление соответствия;
- 3) задания, в которых ответ должен быть дан в виде числа, слова, символа, формулы.

мулы.

*Ответы заданий части В запишите на бланке ответов напротив номера задания.*

Б1. При каких точечных группах симметрии молекула имеет собственный дипольный момент:

- а)  $C_{nv}$ ;
- б)  $S_n$ ;
- в)  $C_n$ ;
- г)  $S_4$ .

Б2. В зависимости от электронного строения атомы и молекулы могут различаться своими магнитными характеристиками. Определите соответствие:

|                       |    |              |                      |              |              |              |  |
|-----------------------|----|--------------|----------------------|--------------|--------------|--------------|--|
| 1) парамагнетизм      | а) | $\uparrow$   | $\uparrow$           | $\uparrow$   | $\uparrow$   | $\uparrow$   |  |
| 2) диамагнетизм       | б) |              | $\uparrow\downarrow$ |              |              |              |  |
| 3) ферромагнетизм     | в) | $\downarrow$ | $\downarrow$         | $\downarrow$ | $\downarrow$ | $\downarrow$ |  |
| 4) антиферромагнетизм | г) |              | $\uparrow$           |              |              |              |  |

Б3. Какие методы относятся к рентгеноструктурной съемке:

- а) метод Лауэ;
- б) способ Фурье;
- в) метод вращения;
- г) метод Гуи.

Б4. Как обозначается вертикальная плоскость симметрии?

Б5. Условие резонанса.

### Часть С

*Ответы к заданиям части С формулируйте в свободной краткой форме и записывайте в бланк ответов.*

- С1. Условие дифракции.
- С2. Мультиплетность – это
- С3. Ось симметрии второго порядка – это
- С4. В чем заключается эффект Мёссбауэра?
- С5. Константа СТС – это

### 6.4 Темы, вынесенные на самостоятельное изучение

1. Методы исследования веществ - физические, химические и физико-химические. Классификация методов исследования. Общая характеристика методов.

2. Оптические методы исследования. Атомная спектроскопия. Методы атомного спектрального анализа.

3. Спектроскопические методы исследования.

Общая характеристика и классификация методов. Электромагнитное излучение, природа электромагнитного излучения. Взаимодействие излучения с веществом.

Поглощение, испускание, рассеяние. Основные законы светопоглощения и испускания. Светорассеяние.

Физические и химические свойства молекул и веществ. Происхождение молекулярных спектров. Наблюдение и регистрация спектроскопических сигналов.

4. Методы колебательной спектроскопии. ИК-спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская).

Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии и их классификация. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Характеристичность нормальных колебаний. Применение методов колебательной спектроскопии для идентификации веществ, структурно-группового, молекулярного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров.

Техника и методики ИК-спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура для ИК спектроскопии, приготовление образцов. Аппаратура для спектроскопии КР. Сравнение методов ИК и КР, их преимущества и недостатки.

Туннельная колебательная спектроскопия. Оптическое детектирование одиночных молекул

5. Методы электронной спектроскопии.

Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул.

Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Специфика электронных спектров поглощения различных классов соединений. Техника и методики эмиссионной и абсорбционной спектроскопии в видимой и УФ областях, аппаратура, чувствительность методов.

Оже-электронная спектроскопия. Применение ОЭС.

6. Люминесценция и люминесцентные методы.

Виды люминесценции. Спектры поглощения и люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция. Основные закономерности молекулярной фотолюминесценции.

Тушение люминесценции (температурное, концентрационно, посторонними веществами). Квантовый выход.

Флуорометрический метод анализа. Аппаратурное оформление процесса.

7. Рефрактометрия. Диэлькометрия и магнетохимия.

Электрические и оптические свойства молекул. Электронная, атомная и ориентационная поляризация. Поляризация деформации.

Дисперсия света. Применение молекулярной рефракции и дисперсии для установления строения молекул. Рефрактометрические константы как критерий чистоты вещества и средство идентификации.

Методы определения показателя преломления. Приборы для измерения показателей преломления. Методы определения дипольного момента на основе измерения диэлектрической проницаемости, диэлькометрия.

Магнитные свойства вещества.

8. Хроматографический анализ. Способы осуществления качественного хроматографического анализа. Идентификация веществ по параметрам удерживания.

Типовые задачи и основные экспериментальные приемы качественного анализа. Характеристики удерживания в КХА.

9. Капиллярный электрофорез.

Электроосмотический поток. Физико-химические основы разделения. Конструктивные особенности прибора для капиллярного электрофореза.

Капиллярный зонный электрофорез. Возможности метода. Движение и размывание зон.

Мицеллярный капиллярный электрофорез. Капиллярный гель-электрофорез.

### **6.5 Примерный перечень вопросов к зачету**

1. УФ. Вид и положение полос поглощения. Электронные переходы, правила отбора.

2. УФ. Законы поглощения света веществом, ограничения.

3. УФ. Образцы. Влияние растворителя и температуры на вид полос поглощения. Хромо-

форы и ауксохромы.

4. УФ. Ненасыщенные соединения с изолированными и сопряженными связями.
5. УФ. Карбонильные соединения.
6. УФ. Поглощение бензола и его монозамещенных.
7. УФ. Поглощение ди- и полизамещенных бензола. Полосы переноса заряда.
8. УФ. Поглощение ароматических поли- и гетероциклических соединений.
9. Исследование органических соединений с помощью УФ спектроскопии: взаимное расположение хромофоров, цис-транс-изомерия, стерические эффекты.
10. ИК. Типы частот поглощения. Условия характеристичности частот. Типы колебаний и интенсивность полос поглощения.
11. ИК. Зависимость частоты колебаний от массы атомов и кратности связи. Основные области ИК спектра.
12. ИК. Поглощение предельных (в том числе циклических) углеводородов.
13. ИК. Поглощение непредельных углеводородов.
14. ИК. Поглощение ароматических углеводородов и соединений, содержащих группы  $\text{OH}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CN}$  и  $\text{Hal}$ .
15. ИК. Поглощение соединений с  $\text{C=O}$  группой (кроме амидов).
16. ИК. Поглощение амидов и аминов.
17. Особенности регистрации масс-спектров. Образование молекулярного иона и его фрагментация. Возможности и недостатки масс-спектрометрии.
18. Масс-спектрометрия: молекулярные, изотопные и метастабильные пики.
19. Масс-спектрометрия. Основные закономерности фрагментации органических молекул.
20. Масс-спектрометрия. Общий вид масс-спектра и анализ области молекулярного иона.
21. Спин ядра. Его корреляция с зарядом и массовым числом. Ориентация ядерного спина в магнитном поле.
22. ЯМР. Энергия спиновых состояний. Условие резонанса и его экспериментальное обнаружение.
23. Спектроскопия ЯМР: определение, возможности, особенности, ограничения.
24. ЯМР. Индуцированное и эффективное магнитное поле. Константа экранирования. Абсолютный и относительный химический сдвиг.
25. Закономерности химических сдвигов сигналов ЯМР магнитных изотопов одного и того же элемента. Количество вещества образца. ЯМР других ядер.
26. ЯМР. Химический сдвиг. Эталоны. Развертка по полю и по частоте. Зависимость химического сдвига от  $H_0$ .
27. ЯМР. Молекулярные магнитные поля за счет удаленных связей. Взаимодействие электронов через пространство: влияние на химический сдвиг.
28. ЯМР. Влияние структурных особенностей молекулы на химический сдвиг: гибридизация атома углерода, электронное влияние заместителей.
29. ЯМР. Влияние внешних факторов на химический сдвиг: температура, концентрация, кислотность среды, растворитель.
30. Прямое и не прямое спин-спиновое взаимодействие. Причины и объяснение мультиплетности сигналов ЯМР на примере уксусного альдегида.
31. ЯМР. Непрямое спин-спиновое взаимодействие ядер. Знак константы  $J$ .
32. ЯМР. Константа спин-спинового взаимодействия. Формула мультиплетности. Границы применимости.
33. ЯМР. Вицинальные и дальние КССВ.
34. ЯМР. Свойства КССВ.  $1J$  и  $2J$  - константы.
35. ЯМР-спектры высших порядков. Признаки. АВ-спектр.
36. ЯМР. Спиновые системы. Спектры 1-ого порядка. АХ-спектр.
37. Степень сложности ЯМР-спектров и анализ спектров 1-ого порядка. Ядерный эффект Оверхаузера.
38. ЯМР. Пояснение правила о постоянстве доли суммарной интегральной интенсивности

на примере п-этоксиацетанилида.

39. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР.
40. Способы упрощения ЯМР-спектров. Двойной резонанс. Подавление ССВ.
41. Методы магнитного резонанса. Метод ЭПР. Сущность явления ЭПР. Устройство электроспектрометра. Практическое применение метода.
42. Спектры ЭПР, их основные параметры, g-фактор и константа СТС.
43. Природа сверхтонкой (СТС) и дополнительной сверхтонкой структуры (ДСТС).
44. Эмпирическое правило аддитивности.
45. Анизотропные и изотропные спектры ЭПР и их параметры.

## **7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ**

1. Мультимедийные презентации по основным разделам дисциплины.
2. Программное обеспечение дисциплин: Microsoft Windows, Microsoft Office, IBM / DOFREL / IBM SPSS Statistics Base, MatLab, Adobe Photoshop CS3, AutoCAD, CorelDraw Graphics Suite, Autodesk 3ds Max, SolidWorks.

Обеспечен доступ к Cambridge Structural Database System, Version 5.36, 2014 - Кембриджский банк структурных данных содержит библиографические, кристаллографические и химические сведения более, чем о 700 000 органических, металлоорганических и неорганических соединениях.

Программный пакет PC GAMESS (Firefly) для выполнения квантово-механических расчетов, в том числе моделирование колебательных спектров многоатомных молекул, расчет энергии и параметров структуры (длины связей, углы), расчеты потенциальных кривых молекул в основном и возбужденном состояниях со спектроскопической точностью, расчеты энергетических профилей химических реакций.

## **8 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ**

### **Основная**

1. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии: учебник / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. – М. : Мир, 2006. – 688 с.
2. Физические методы исследования неорганических веществ: учеб. пособие / под ред. А.Б. Никольского. – М. : Издательский центр «Академия», 2007. – 448 с.

### **Дополнительная**

1. Васильева, В.И. Спектральные методы анализа. Практическое руководство / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина и др., под ред. В.Ф. Селеменова и В.Н. Семенова. – СПб.: изд-во Лань, 2014. – 416 с.
2. Марченко, З. Методы спектрофотометрии в УФ и видимой областях в неорганическом анализе / З. Марченко, М. Бальцежак. – М. : Бином. Лаборатория Знаний, 2007. – 711 с.2.
3. Отто, М. Современные методы аналитической химии / М. Отто; пер. с нем. Под ред. А.В. Гармаша. – М. : Техносфера, 2008. – 543 с.
4. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии: учебник / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. – М. : Мир, 2009. – 688 с.
5. Руководство по проведению семинарских занятий по физико-химическим методам анализа: метод. указания / сост.: Н.В. Чернявская, А.И. Лыткин, С.В. Душина; под ред. М.И. Базанова; Иван. гос. хим.-технол. ун-т – Иваново, 2010. – 68 с.

### **8.3 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

<http://en.edu.ru/>  
<http://rcr.ioc.ac.ru/ukh.htm>

## **9 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА**

учебное (учебно-научное) оборудование: ИК-спектрометр с Фурье-преобразователем, УФ-спектрометр, спектрометр атомно-абсорбционный AAnalyst 400, спектрометр рентгенофлуоресцентный Эра-3, спектрометр рентгенофлуоресцентный ARL ADVANT X, спектрометр эмиссионный с индуктивно-связанной плазмой PRODIGY, дифрактометр порошковый рентгеновский ARL XTRA, дериватограф, электронный микроскоп, ЯМР релаксометр, иономер – 10 шт., встряхиватель – 1 шт., прибор измерительный универсальный – 3 шт., поляриметр – 2 шт., потенциометр – 2 шт., КФК-3 – 1 шт., кондуктометр АНИОН-4120 – 3 шт., вискозиметр – 4 шт., мешалка магнитная – 2 шт., электроды со штативами, модуль «Термостат» – 3 шт., модуль «Электрохимия» – 3 шт., модуль «Термический анализ» – 3 шт., штатив лабораторный – 8 шт., центрифуга лабораторная – 1 шт., весы -300 – 3 шт., весы ВА-4М – 3 шт., спектрофотометр – 1 шт., амперметр – 1 шт., гальванометр – 1 шт., калориметр – 1 шт., секундомер – 3 шт., выпрямитель – 7 шт., прибор 4831 – 5 шт., микровольтметр – 1 шт., pH-тестер – 6 шт., компьютер – 3 шт.

химические реактивы (классификация не ниже ч.д.а): растворы солей, растворы кислот, растворы щелочей, растворы аммиака, концентрированные растворы кислот, концентрированные растворы щелочей, концентрированные растворы аммиака, сухие соли, специальные реактивы и органические растворители, индикаторная бумага, растворы индикаторов.

лабораторная посуда: колба мерная на 50, 100, 200, 250, 500, 1000 мл; бюретки на 5, 25, 50 мл; пипетка на 1, 2, 5, 10, 20, 25, 50 мл; колбы конические для титрования на 150, 250, 500 мл; стаканы химические на 50, 100, 250, 500, 1000 мл; чашки Петри, часовые стекла, выпарительные чашки, фарфоровые ступки, тигли, бюксы с крышками, стеклянные капилляры, склянки для реактивов, центрифужные пробирки, полумикропробирки.

другое необходимое оборудование: шпатели, штативы для пробирок, штативы железные с набором колец, лапок, деревянные или металлические держатели для пробирок, тигельные щипцы, асбестовые сетки.

### **ОСОБЕННОСТИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ**

Для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья предусмотрены следующие формы организации педагогического процесса и контроля знаний:

- для слабовидящих:

- обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс;

- для выполнения контрольных заданий при необходимости предоставляется увеличивающее устройство;

- задания для выполнения, а также инструкции о порядке выполнения контрольных заданий оформляются увеличенным шрифтом (размер 16-20);

- для глухих и слабослышащих:

- обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающимся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- для лиц с тяжелыми нарушениями речи, глухих, слабослышащих все контрольные задания по желанию могут проводиться в письменной форме.

Основной формой организации педагогического процесса является интегрированное обучение инвалидов, т.е. все обучающиеся учатся в смешанных группах, имеют возможность постоянно общаться со сверстниками, легче адаптируются в социуме.

Рабочая программа дисциплины разработана на основе:

- ФГОС ВО, утверждённого приказом Министерством образования и науки РФ от 30 июля 2014 г. № 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»;
- Учебного плана по направлению подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ, утвержденного Ученым советом БГПУ от «4» июня 2015 г. Протокол № 6;
- Приказа Министерства образования и науки РФ № 1259 от 19.11.2013 г. «Об утверждении порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)»;
- СМК СТО 7.3-2.9.07 – 2015 Положения о программе аспирантуры ФГБОУ ВПО «БГПУ», утвержденного и введенного в действие Решением Ученого совета ФГБОУ ВПО «БГПУ» № 2 от 25 февраля 2015 г.

Разработчик:

Е.В. Новикова, кандидат химических наук, доцент;

А.В. Иванов, доктор химических наук, профессор.

### 10 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ

**Утверждение изменений в рабочей программе дисциплины для реализации в 2015/2016 уч. г.**

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2015/2016 учебном году на заседании кафедры (протокол № 9 от 4 июня 2015 г.).

В рабочую программу дисциплины внесены следующие изменения и дополнения:

|                                               |                                                                                                                                                                                    |
|-----------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| № изменения: 1<br>№ страницы с изменением: 23 |                                                                                                                                                                                    |
| Исключить:                                    | Включить:                                                                                                                                                                          |
|                                               | Список литературы и информационных ресурсов. Дополнительная<br>Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии: учебник / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. – М. : Мир, 2009. – 688 с. |
| № изменения: 2<br>№ страницы с изменением: 24 |                                                                                                                                                                                    |
| Исключить:                                    | Включить:                                                                                                                                                                          |
|                                               | Пункт<br>Особенности освоения дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья                                                                                |