

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Дата подписания: 16.09.2022 15:38:32

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

8 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Физико-химические методы исследования структуры органических соединений

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Ворончихина Л.И. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины:**

Развитие органической химии невозможно без использования физических методов исследования и химик-органик должен уметь применять любые методы, которые могут оказать ему помощь в решении стоящих перед ним задач. Применяемые в органической химии физические методы весьма разнообразны. Однако наиболее эффективно используются некоторые виды спектроскопии: ультрафиолетовая, инфракрасная и спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

Выбор методов исследования обусловлен как широтой их применения в практике химиков-органиков для установления строения синтезируемых соединений и выяснения их физических и химических свойств, так и оснащенностью соответствующим оборудованием кафедры.

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

**Задачами** освоения дисциплины являются:

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

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина «Физико-химические методы исследования структуры органических соединений» входит в Элективные дисциплины 5 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Курс опирается на такие ранее изученные дисциплины, такие как неорганическая химия, органическая химия, аналитическая химия, физическая химия. Изучение данного курса благоприятствует успешному изучению последующих дисциплин

### **3. Объем дисциплины: 5 зачетных единиц, 180 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа:** лекции - 35 часов, лабораторные работы - 35 часов;

**самостоятельная работа:** 83 часа, контроль - 27 часов.

### **4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР  ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР  ПК-1.3 Готовит объекты исследования
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)  ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
зачет в 5-м семестре, экзамен в 6-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа, в том числе Контроль (час.)
		Лекции	Лабораторные работы (остаток)	Контроль самостоятельной работы (в том числе курсовая работа)	

<p><b>Введение.</b> Предмет и задачи курса. Спектроскопия как средство исследования органических молекул. Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии (ИК, УФ, КР), ядерной спектроскопии (ЯМР, ЯКР), спектроскопии ЭПР и использование их как средств исследования органических соединений.</p> <p>Новые возможности в исследовании органических веществ, гамма-резонансная спектроскопия (мессбауэровская), фотоэлектронная и рентгеноэлектронная спектроскопия, рентгеноструктурный и электронографический методы. Применение ЭВМ для установления строения органических соединений.</p>	16	1	1		14
<p><b>Тема 1. Общие сведения о спектрах</b></p> <p>Характеристика электромагнитного излучения. Основные параметры: длина волны, частота, волновое число. Область оптических спектров: ИК-область, видимая и ультрафиолетовая. Законы поглощения света. Объединенный закон Ламберта-Бэра. Способы изображения спектров поглощения</p>	28	6	6		16

<p><i>Тема 2. Инфракрасная спектроскопия</i>          Происхождение спектров. Колебания и спектры двух- и многоатомных молекул. Число полос в спектре. Нормальные колебания. Скелетные и групповые частоты (характеристические). Связь колебательных спектров со строением органических соединений. Анализ частот некоторых групп. Экспериментальные данные по классам органических соединений. Общие сведения о спектроскопии комбинационного рассеяния (СКР). Происхождение спектров СКР и необходимость их применения для полной характеристики колебаний молекул.</p>	24	4	4		16
<p><i>Тема 3. Электронные спектры органических молекул</i>          Основные вопросы, решаемые с помощью УФ-спектроскопии. Происхождение электронных спектров. Классификация электронных переходов. Терминология и обозначения, применяемые в электронной спектроскопии: батохромный (красный) и гипсохромный (синий) сдвиги, сольватохромные эффекты, хромофоры, ауксохромы. Электронные спектры основных классов органических соединений. Ненасыщенные соединения, карбонильные соединения. Эффекты сопряжения в электронных спектрах: бутадиен, винилоли, полиены <math>C=C-C=O</math>. Эмпирические правила вычисления максимумов <math>\lambda_{max}</math> полос поглощения в сопряженных системах (правило Вудворда).</p>	28	6	6		16

<p><i>Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР)</i>          Основы метода ЯМР.          Магнитные свойства ядер.          Явление ЯМР в классической трактовке. Принципиальная схема простейшего ЯМР-спектрометра. Химический сдвиг и его измерение.          Внешние и внутренние эталоны. Различные шкалы химических сдвигов и соотношение между ними.          Использование химических сдвигов в структурном анализе.          Таблицы химических сдвигов.          Расчет химических сдвигов протонов по аддитивной схеме.          Тонкая структура сигналов ЯМР и ее происхождение.          Спин-спиновое взаимодействие. Основные сведения о возможности применения ЯМР <math>C^{13}</math>, <math>P^{31}</math>, <math>F^{19}</math> и др.</p>	28	6	6		16
<p><i>Тема 5. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)</i>          Физическая природа явлений.          Вид спектров ЭПР простейших радикалов. Возможности использования ЭПР в органической химии. Масс-спектрометрия. Молекулярная масса и определение молекулярной формулы. Масс-спектрометрический распад.          Происхождение и интерпретация масс-спектров</p>	28	6	6		16

<b>Тема 6. Рефрактометрические методы</b> Показатель преломления и удельная рефракция. Поляризуемость и ее связь с удельной и молекулярной рефракцией. Структурные инкременты и групповые рефракции. Рефракции связей. Соотношения между рефракциями связей и атомными рефракциями. Границы приложимости аддитивной схемы экзальтации молекулярной рефракции. Применение молекулярной рефракции для определения строения органических соединений, особенности структуры, выявляемые с помощью молекулярной рефракции	28	6	6		16
<b>ИТОГО</b>	<b>180</b>	<b>35</b>	<b>35</b>		<b>110</b>

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)	Вид занятия	Образовательные технологии
<b>Введение.</b> Предмет и задачи курса. Спектроскопия как средство исследования органических молекул.	Лекция Лабораторная работа	Традиционные (фронтальная лекция) Технология проблемного обучения Групповая работа
<b>Тема 1. Общие сведения о спектрах</b>	Лекция Лабораторная работа	Традиционные (фронтальная лекция) Технология проблемного обучения Групповая работа
<b>Тема 2. Инфракрасная спектроскопия</b>	Лекция Лабораторная работа	Традиционные (фронтальная лекция) Технология проблемного обучения Групповая работа
<b>Тема 3. Электронные спектры органических молекул</b>	Лекция Лабораторная работа	Традиционные (фронтальная лекция) Технология проблемного обучения Групповая работа

<b>Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР)</b>	Лекция	Традиционные (фронтальная лекция)
	Лабораторная работа	Технология проблемного обучения Групповая работа
<b>Тема 5. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)</b>	Лекция	Традиционные (фронтальная лекция)
	Лабораторная работа	Технология проблемного обучения Групповая работа
<b>Тема 6. Рефрактометрические методы</b>	Лекция	Традиционные (фронтальная лекция)
	Лабораторная работа	Технология проблемного обучения Групповая работа

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

##### **1. Материалы для проведения текущей аттестации**

##### **ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ И УПРАЖНЕНИЙ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

1. В ЯМР-спектре соединения, имеющего состав  $C_2H_4Br$ , имеется дублет в сильном поле 2,5 м.д. и квартет в слабом поле 5,8 м.д. с соотношением площадей 3:1. Какое строение имеет соединений?
2. Напишите структуры соединений  $C_3H_3Cl_5$  (а) и  $C_3H_3Cl_3$  (б), которым соответствуют следующие данные ЯМР: а) триплет 4,52 м.д. и дублет 6,07 м.д. с соотношением площадей сигнала протона 1:2; б) синглет 2,20 м.д. и дублет 4,02 м.д. с соотношением площадей  $3H : 2H$ .
3. Предложите структурные формулы веществ состава  $C_8H_7OCl$  и их ИК-характеристики.
4. Вещество состава  $C_8H_{10}O$  имеет два изомера. Предложите их структуры и укажите данные их ПМР-спектров.
5. Определите структурную формулу соединения состава  $C_7H_8SH$ , если в спектре ЯМР этого соединения обнаружены сигналы при 7,2; 3,27; 2,30 м.д.
6. Предскажите ИК- и ЯМР-спектры соединений:  $CH_3C_6H_4-OCH_2CH_3$  и  $C_6H_5CH_2OCH_2CH_3$ .
7. Укажите различия в ИК-спектрах ацетона, ацетоуксусного эфира и ацетофенона.
8. Предскажите структуру и спектральные данные соединения состава  $C_3H_3Cl_5$ .
9. Как различить по ИК- и ЯМР-спектрам толуол, *n*-ксилол и мезитилен.
10. Соединения  $CHCl_2-CHCl_2$  ( $\delta=6,0$  м.д.) и  $CCl_3-CH_2Cl$  ( $\delta=3,9$  м.д.) дают в ЯМР-спектрах синглеты. Объясните происхождение синглетов и различия в химических сдвигах.



11. При комнатной температуре циклогексан имеет один пик в ЯМР-спектре. При температуре до  $-70^{\circ}\text{C}$  сигнал уширяется, а при  $-100^{\circ}\text{C}$  разделяется четко на два пика. Объясните наблюдаемое явление.
12. Исследуемое соединение содержит метильную и метиленовую группы и растворяется в воде, метаноле, этаноле,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CHCl}_3$ , бензоле, ацетоне. Какие из названных растворителей следует использовать для записи спектров ЯМР?
13. Предложите ИК- и ЯМР-спектральные характеристики для бензилацетата.
14. Как с помощью ЯМР-спектров различить соединения состава  $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$ ?
15. Как с помощью ИК-спектров различить ацетилацетон, диметилсульфоксид и ацетон?
16. Определите структуру соединения  $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$ , если в спектре присутствуют следующие полосы поглощения: 1680 (с.); 1600 (ср.); 1580 (ср.); 1450 (ср.); 1360 (с.); 1265 (с.); 755 (с.); 690 (с.)  $\text{cm}^{-1}$ .
17. Фенол с диоксаном образует водородную связь. Предскажите, как изменится прочность такой водородной связи при введении в молекулу фенола следующих заместителей: *n*- $\text{CH}_3$ ; *m*- $\text{Cl}$ ; *n*- $\text{Cl}$ ; *n*- $\text{NO}_2$ ; *m*- $\text{CH}_3\text{O}$ ; *n*- $\text{CH}_3\text{O}$ .
18. В ИК-спектре цис 1,2-циклопентандиола полоса поглощения ОН-группы имеет более низкую частоту, чем полоса поглощения свободной ОН-группы; и эта полоса не исчезает даже при сильном разбавлении. Приведите возможные объяснения.
19. В какие функциональные группы входят атомы кислорода и азота в соединении с брутто формулой  $\text{C}_7\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_7$ , если в ИК-спектре наблюдаются интенсивные полосы при  $1590 \text{ cm}^{-1}$  и  $1330 \text{ cm}^{-1}$ , широкая полоса в области  $3500\text{--}3360 \text{ cm}^{-1}$  и полосы при  $1125$  и  $1047 \text{ cm}^{-1}$ .
20. В ИК-спектре ацетилацетона наблюдаются следующие полосы поглощения:  $1730$ ;  $1680$ ;  $1640 \text{ cm}^{-1}$ . Сделайте отнесение этих полос, учитывая таутомерию соединения.
21. В ПМР-спектре лаурокса-9 (неионогенное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{COO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n\text{H}$ , где  $n_{\text{ср}}=9$ ) обнаружены следующие сигналы,  $\delta_{\text{м.д.}}$ : 0,80; 1,20; 2,15; 3,40; 4,0; 2,85; а в ИК-спектре имеются полосы поглощения,  $\text{cm}^{-1}$ : 3400, 2930, 2860, 1740, 1380, 720, 1355, 1055, 1115. Сделайте отнесение полос и сигналов в спектрах лаурокса-9.
22. В ИК-спектре синтанола ДС-10 (неионогенное ПАВ общей формулы  $\text{RO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n\text{H}$ , где  $n_{\text{ср}}=10$ ) имеются следующие полосы поглощения,  $\text{cm}^{-1}$ : 3450, 2870, 2935, 1465, 725, 1350, 1050, 1100 и в ПМР-спектре следующие сигналы  $\delta_{\text{м.д.}}$ : 0,80; 1,20; 3,45; 4,05.
23. Какие полосы поглощения в ИК-спектре и резонансные сигналы протонов в ЯМР-спектре можно предсказать для лаурата натрия (анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{12}\text{H}_{23}\text{O}_2\text{Na}$ ).
24. В ПМР-спектре лауратамоноэтаноламмония (растворитель  $\text{CCl}_4$ ), анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{14}\text{H}_{31}\text{O}_3\text{N}$ , имеются следующие сигналы  $\delta_{\text{м.д.}}$ : 0,84; 1,24; 2,0; 2,82; 3,56; 7,6 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 8, 2, 2, 2, 4 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения,  $\text{cm}^{-1}$ : 3300, 3050, 2960, 2930,

2860, 1560, 1425, 1465, 1380, 1180-1350, 725. Сделайте отнесение данных ИК- и ПМР-спектров в соответствии со структурой соединения.

**25.** Предложите ИК- и ПМР-спектры для октилсульфоната натрия (анионное ПАВ общей формулы  $C_8H_{17}SO_3Na$ ).

**26.** Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилсульфата натрия (анионное ПАВ общей формулы  $C_{10}H_{21}SO_4Na$ ).

**27.** В ПМР-спектре моноцетилфосфата натрия (анионное ПАВ общей формулы  $C_{16}H_{33}PO_4Na_2$ ) имеются следующие сигналы,  $\delta$ м.д.: 0,80; 1,20; 3,65 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 28, 2 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения,  $cm^{-1}$ : 2965, 2930, 2860, 1470, 1380, 1160, 1140, 1080, 1110, 1010, 725. Соотнесите данные спектров со структурой соединения.

**28.** В ИК-спектре N-децилпиридиний хлорида (катионное ПАВ общей формулы  $C_{15}H_{26}NCl$ ) имеются следующие полосы поглощения,  $cm^{-1}$ : 3025, 2930, 2860, 1635, 1585, 1505, 1490, 1470, 1380, 780, 685, 720. В ПМР-спектре имеются следующие сигналы протонов,  $\delta$ м.д.: 0,81; 1,20; 1,85; 4,70; 8,26; 8,71; 9,40 с интегральными интенсивностями 3, 8, 2, 2, 2, 1, 2 соответственно. Сделайте вывод о структуре соединения и предложите отнесение сигналов и полос в молекуле.

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

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

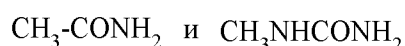
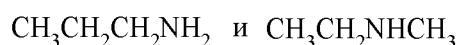
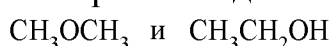
**31.** В анилине хромофором является не только бензольное кольцо, но и неподеленная электронная пара азота. Оба хромофора сопряжены друг с другом. Образование соли при действии разбавленной серной кислоты изменяет спектр анилина. В УФ-спектре анилина обнаружена поглощение при 286 нм и 234 нм. Сделайте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

**32.** Строение органического соединения общей формулы  $C_{12}H_{11}N$  может быть представлено следующими двумя структурами:



Предложите данные ИК-спектров для различия этих структур

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



## ТИПОВЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РЕЙТИНГОВОГО КОНТРОЛЯ

### I модуль

#### Задание №1

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 3050, 2220, 1600, 1500, 1510, 1480, 858, 830, 730

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

Задание №2

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 3200-3000, 1680, 1620, 1580, 1500, 1450, 980, 935, 765, 708

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

Задание №3

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 3320, 2940, 1600, 1460, 1380, 1210

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

Задание №4

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 2870, 2220, 1465, 1420, 1380, 1200

- а) *n*-метоксибензнитрил
- б) ацетиленкарбоновая кислота
- в) нитрил метоксипропионовой кислоты

Задание №5

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 3280, 2940, 1460, 1375, 1355

- а) диметилкарбинол
- б) *n*-хлорбензойная кислота
- в) диметиланилин

Задание №6

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 2940, 2230, 1440, 1380

- а) нитрил фенилуксусной кислоты
- б) нитрил пропионовой кислоты
- в) ацетиленкарбоновая кислота

Задание №7

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 3010, 2920, 1600, 1500, 1460, 1380, 740

- а) диметилбензол
- б) бензальдегид
- в) уксусная кислота

Задание №8

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра,  $\text{см}^{-1}$ : 3030, 2950, 1590, 1500, 1460, 1375, 795

- а) *n*-нитробензальдегид

- б) *n*-метилтолуол
- в) *m*-хлорбензамид

Задание №9

Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, см<sup>-1</sup>: 3070, 2930, 1600, 1480, 1430, 735, 690, 705

- а) метоксибензол
- б) метилфенилсульфид
- в) тиофенол

Задание №10

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

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

Задание №11

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

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

Задание №12

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

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

## *II модуль*

Задание №1

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

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

Задание №2

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

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

Задание №3

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

- а) бензойная кислота
- б) нитробензол
- в) β-хлорэтоксibenзол

Задание №4

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

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

Задание №5

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

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

Задание №6

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

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

Задание №7

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

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

Задание №8

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

- а) ( $\beta$ -гидрокси)этилбензол
- б) *n*-этоксibenзол
- в) бензиловый спирт

Задание №9

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

- а) бензмеркаптан
- б) *n*-метилтиофенол
- в) бензальдегид

Задание №10

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

- а) толуол
- б) этилбензол
- в) 1,2-диметилбензол

Задание №11

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

а) 1,4-диметилбензол

б) *n*-метилфенол

в) толуол

Задание №12

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

а) пропан

б) бутиламин

в) нитропропан

## 2. Материалы для проведения промежуточной аттестации

Результат (индикатор)	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
ПК-1.1	<p>1. Как изменится положение полос поглощения в УФ-спектре <i>n</i>-нитрофенола при замене изооктана на этанол?</p> <p>2. Предложите ИК-спектральные характеристики ацетона, анилина и формальдегида.</p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p> <p>Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)</p>
ПК-1.2	<p>1. Как различить по ПМР-спектрам ацетонитрил, метилакрилат и ацетон?</p> <p>2. Какие соединения можно различить по УФ-спектрам?</p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p> <p>Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)</p>
ПК-1.3	<p>1. Приведите данные ПМР-спектра толуола</p> <p>2. Какие растворители необходимо использовать для записи ПМР-спектров?</p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p>

		Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)
<b>ПК-2.1</b>	<p><b>34.</b> Исследуемое соединение содержит метильную и метиленовую группы и растворяется в воде, метаноле, этаноле, <math>CCl_4</math>, <math>CHCl_3</math>, бензоле, ацетоне. Какие из названных растворителей следует использовать для записи спектров ЯМР?</p> <p><b>35.</b> Как различить по ИК-спектрам толуол, <i>n</i>-ксилол и мезитилен.</p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p> <p>Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)</p>
<b>ПК-2.2</b>	<p>1. Использование химических сдвигов в структурном анализе</p> <p>2. Как с помощью ЯМР-спектров различить соединения состава <math>C_2H_3Cl_3</math>?</p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p> <p>Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)</p>

## V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 1) Литература

#### а) Основная литература:

1. Бёккер Ю. Спектроскопия [Электронный ресурс] : учебник / Ю. Бёккер. — Электрон. текстовые данные. — М. : Техносфера, 2009. — 528 с. — 978-5-94836-220-5. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/12735.html>

#### б) Дополнительная литература:

1. Орлова А.М. Органическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / А. М. Орлова; А.М. Орлова. - Москва : Московский государственный строительный университет, Ай Пи Эр Медиа, ЭБС АСВ, 2016. - 230 с. – Электронный ресурс. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/48034.html>

### 2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

### 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Ин-тернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://www.xumuk.ru/>
2. <http://nehudlit.ru/books/subcat283.html>
3. [http://www.krugosvet.ru/enc/nauka\\_i\\_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html](http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html)
4. <http://elibrary.ru/>
5. <http://www.medbook.net.ru/23.shtml>
6. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kolman/index.htm>

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЗАЧЕТА**

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



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

### **ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ИТОГОВОГО ЭКЗАМЕНА**

1. Спектроскопия как средство исследования органических молекул.
2. Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии.
3. Характеристика электромагнитного излучения. Основные параметры.
4. Область оптических спектров: ИК-, видимая и ультрафиолетовая.
5. Законы поглощения света. Объединенный закон Ламберта – Бера.
6. Происхождение ИК-спектров. Нормальные колебания.
7. Связь колебательных спектров со строением органических соединений.
8. Основные вопросы, решаемые с помощью УФ-спектроскопии.
9. Происхождение электронных спектров. Основные хромофоры.
10. Эффекты сопряжения в электронных спектрах.
11. Основы метода ЯМР. Явление ЯМР в классической трактовке.
12. Химический сдвиг и константа Спин-спинового взаимодействия.
13. Использование химических сдвигов в структурном анализе.

14. Физическая природа происхождения спектров ЭПР.
15. Масс-спектроскопия. Происхождение и интерпретация спектров.
16. Рефрактометрические методы и их применение для определения строения органических соединений.
17. Спектроскопия  $^{13}\text{C}$  – ЯМР. Основы метода. Применение в органической химии.
18. Способы изображения спектров.
19. Условия измерения спектров поглощения в ИК-области.
20. Растворители, применяемые при измерении электронных спектров поглощения. Влияние растворителей на спектр.
21. Измерение спектров протона магнитного резонанса.

## ОБРАЗЦЫ ЭКЗАМЕНАЦИОННЫХ БИЛЕТОВ

### Билет №

1. Законы поглощения света.
2. Структурные изомеры бензиламин и *m*-толуидин имеют различные  $^1\text{H}$  ЯМР-спектры. Укажите спектральные особенности и сделайте примерное отнесение сигналов.
3. Слезоточивая жидкость  $\text{C}_4\text{H}_9\text{Cl}_2$  имеет следующие спектральные характеристики: в ЯМР-спектре наблюдается сигнал при 4,2 м.д. (в  $\text{CCl}_4$ ); в ИК-спектре проявляются полосы при  $\nu \approx 2960$  (сл.); 1430 (сп.); 1265 (о.с.); 1165 (с.); 710 (о.с.)  $\text{cm}^{-1}$ . Определите структуру соединения.

### Билет №

1. Использование химических сдвигов в структурном анализе.
2. Какие изменения можно ожидать в УФ-спектре анилина при добавлении в раствор  $\text{HCl}$ ?
3. Твердое вещество  $\text{C}_8\text{H}_4\text{N}_2$  имеет следующие спектральные характеристики: в ЯМР-спектре синглет при 7,8 м.д.; в ИК-спектре  $\nu = 3100$  (сл.); 2240 (с.); 1600 (сл.); 1570 (сл.); 1495 (сп.); 1300 (сл.); 1200 (сл.); 960 (сл.); 770 (с.)  $\text{cm}^{-1}$ . В УФ-спектре  $\lambda_{\text{max}}$  (в этаноле) 283 и 292 нм ( $\epsilon = 1600$  и 1820 соответственно). Определите строение этого соединения.

### Билет №

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

### 3. Рубежный контроль

#### ВОПРОСЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РУБЕЖНОГО КОНТРОЛЯ

1. Иметь представления о спектроскопии как средстве исследования органических молекул.
2. Знать новые возможности в исследовании органических веществ с использованием спектральных методов.
3. Знать основные параметры электромагнитного излучения.
4. Уметь давать определения основным законам поглощения света.
5. Уметь делать отнесение полос поглощения в ИК-спектрах заданных соединений.
6. Понимать природу батохромных и гипсохромных смещений полос поглощения в колебательных и электронных спектрах.
7. Уметь проводить количественные измерения концентрации веществ по их УФ-спектрам.
8. Понимать связь колебательных спектров со строением органических молекул.
9. Уметь определить функциональные группы по их положению в ИК-спектре.
10. Знать основы метода масс-спектропии и приложение метода к установлению структуры органических молекул.
11. Понимать основы (основные положения) метода ЯМР-спектроскопии.
12. Уметь давать определение основным терминам и понятиям.
13. Знать соотношения между  $\delta$  единицей, химическим сдвигом, рабочей частотой прибора и уметь переходить от единиц  $\delta$  в герцы и обратно.
14. Уметь определять количество неэквивалентных протонов и углеродов и предсказывать число сигналов в  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  спектрах.
15. Уметь делать отнесение сигналов к соответствующим протонам и углеродам в спектрах соединений.
16. Предложить структуру соединения на основе спектральных данных.
17. Изобразить примерное положение сигналов в спектре заданного соединения.
18. Предсказать тип расщепления, используя, если необходимо диаграммное дерево.

#### ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПИСЬМЕННОГО ОПРОСА

##### Задание 1.

3. Как изменится положение полос поглощения в УФ-спектре *n*-нитрофенола при замене изооктана на этанол?
4. Предложите ИК-спектральные характеристики ацетона, анилина и формальдегида.

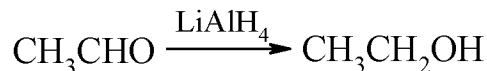
##### Задание 2.

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

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

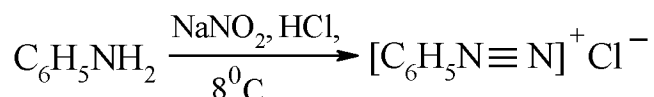
#### Задание 3.

1. Какие соединения можно различить по УФ-спектрам?
2. Какие характеристические частоты можно использовать для контроля за ходом реакции восстановления



#### Задание 4.

1. Как с помощью ИК-спектроскопии можно контролировать ход реакции diazotирования анилина



2. В спектре ПМР смеси бензола и циклогексана содержатся два сигнала (1,4 и 7,3 м.д.) с соотношением интенсивностей 2:1. Определите количественный состав смеси.

#### Задание 5.

1. Какие изменения можно наблюдать в ИК-спектре этанола при проведении реакции этерификации взаимодействием этанола с уксусной кислотой.

2. Соединения  $\text{CHBr}_2\text{-CHBr}_2$  ( $\delta=6$  м.д.) и  $\text{CBr}_3\text{-CH}_2\text{Br}$  ( $\delta=3,9$  м.д.) дают в спектрах ЯМР синглеты вследствие химической эквивалентности атомов водорода. Объясните различия в химических сдвигах.

### ПРИМЕРЫ ЗАДАНИЙ ДЛЯ КОНТРОЛЬНЫХ РАБОТ

#### *Контрольная работа №1*

1. Соединение имеет структурную формулу  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CONH}_2$ . Каковы должны быть спектральные характеристики ИК-, УФ- и ЯМР-спектров?

2. Укажите особенности ИК-спектров следующих соединений: ацетон, уксусная кислота, этилацетат.

3. Как различить по ИК- и ЯМР-спектрам следующие соединения: ацетонитрил, анилин, нитрометан?

4. Предскажите основные характеристики ПМР-спектров следующих соединений: метилэтилкетон, N,N-диметиланилин, *n*-крезол.

5. Переведите химический сдвиг в герцах в единицы  $\delta$  для следующих соединений,  $^1\text{H}$  ЯМР-спектр которых регистрировался на спектрометре с рабочей частотой 60 МГц:

а) 131 Гц

б) 287 Гц

в) 451 Гц

#### *Контрольная работа №2*

1. Сколько резонансных сигналов можно наблюдать в спектре  $^{13}\text{C}$  ЯМР следующих соединений:

а) 1,1-диметилциклогексан

б)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$

в) 3-метилпентин-1

2. Как с помощью ИК-спектроскопии можно различить соединения в следующих парах:

а)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{COCl}$

б)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$

в)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{CHO}$

3. Как должна измениться частота поглощения карбонильной группы  $\text{C}=\text{O}$  в ряду: ацетон – хлорацетон – трифторацетон?

4. В УФ-спектрах 4-диэтиламинобензойной кислоты, снятых в этаноле, проявляется полоса поглощения с максимумом 288 нм ( $\epsilon=19000$ ), а в растворе хлороводородной кислоты – 270 нм ( $\epsilon=1000$ ). В чем причина различия в спектрах?

5. Рассчитайте концентрацию бензойной кислоты при значении оптической плотности 1,9 ( $\lambda_{\text{max}}=228$  нм,  $\epsilon=10660$ ) в кювете толщиной 1 см.

## РУБЕЖНЫЙ КОНТРОЛЬ

*Зачет + экзамен. 60 баллов + 40 баллов*

### 1 модуль:

Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии. Общие сведения о спектрах. Инфракрасная спектроскопия. Новые возможности в исследовании органических соединений: фотоэлектронная и рентгеноэлектронная спектроскопии. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Основы метода ЯМР. Химический сдвиг и его измерение. Использование химических сдвигов в структурном анализе. Спин-спиновое взаимодействие.

Решение задач – 10 баллов

Контрольная работа – 10 баллов

Тестовый контроль – 10 баллов

*I контрольная точка – 30 баллов.*

### 2 модуль

Электронные спектры органических молекул. Классификация электронных переходов. Термины и обозначения в электронной спектроскопии. Эмпирические правила. Электронный парамагнитный резонанс. Рефрактометрические методы. Комплексная оценка структуры молекул по спектральным данным. Масс-спектроскопия. Молекулярная масса и определение молекулярной формулы. Масс-спектрометрический распад. Происхождение и интерпретация масс-спектров.

Тестовый контроль – 10 баллов

Работа со спектрами – 10 баллов

Индивидуальные задания – 10 баллов

*II контрольная точка – 30 баллов.*

Экзамен – 40 баллов

**Всего: 100 баллов**

## **VII. Материально-техническое обеспечение**

информационные технологии:

использование компьютеров для поддержки излагаемого учебного материала

программное обеспечение:

MSOffice 365 proplus

информационно-справочные системы:

<http://www.edu.ru/> Федеральный портал «Российское образование»

<http://elibrary.ru/> Научная электронная библиотека

## **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел I Аннотация.	Измены часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. год	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета