

Федеральное государственное  
бюджетное образовательное  
учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Физические методы исследования органических соединений. Основы  
теории, техника эксперимента, области применения**

**Уровень высшего образования:**

Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Органическая химия

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p><b>ОПК-1.С.</b> Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p><b>ОПК-1.С.1.</b> Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее, оценивает актуальность и степень новизны данных</p>	<p><b>Уметь</b> анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,  <b>Уметь:</b> самостоятельно составлять план исследования  <b>Владеть:</b> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p>
<p><b>СПК-1.С</b> Способен использовать фундаментальные понятия органической химии и основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений при решении задач профессиональной деятельности</p>	<p><b>СПК-1.С.1</b> Предлагает возможные механизмы реакций с участием органических соединений, используя в качестве доказательств спектроскопические данные (ИК, ЯМР, МАСС)</p>	<p><b>Знать:</b> основные закономерности структурного и электронного строения молекул,  <b>Уметь:</b> на основании полученных знания в области строения молекул, используя спектроскопические данные (ИК, ЯМР, МАСС), предлагать структурные формулы неизвестных соединений,  <b>Владеть:</b> методологией выбора метода анализа, иметь навыки их применения в области органической химии, приемами пробоподготовки и её влияния на получаемые результаты.</p>

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 78 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 66 часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен:

**знать** основы классической теории строения молекул, основные представления квантовой химии, в том числе метода молекулярных орбиталей, физику электромагнитного излучения;

**уметь** объяснять связь свойств органических соединений со строением их молекул, в том числе, с учётом их электронной структуры и межмолекулярных взаимодействий;

**владеть** теоретическими знаниями методов установления структур и электронного строения ключевых классов органических соединений в рамках функционального анализа.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	<b>Всего</b>	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	<b>Всего</b>
Раздел 1.	<b>8</b>	<b>2</b>	<b>2</b>				<b>4</b>	4		<b>4</b>
Раздел 2.	<b>12</b>	<b>4</b>	<b>4</b>				<b>8</b>	4		<b>4</b>
Раздел 3.	<b>8</b>	<b>2</b>	<b>2</b>				<b>4</b>	4		<b>4</b>
Раздел 4.	<b>26</b>	<b>10</b>	<b>10</b>				<b>20</b>	6		<b>6</b>
Раздел 5.	<b>8</b>		<b>4</b>				<b>4</b>	4		<b>4</b>
Раздел 6.	<b>8</b>	<b>2</b>	<b>2</b>				<b>4</b>	4		<b>4</b>
Раздел 7.	<b>24</b>	<b>10</b>	<b>8</b>	<b>2</b>			<b>20</b>	4		<b>4</b>
Раздел 8.	<b>14</b>	<b>6</b>	<b>4</b>				<b>10</b>	4		<b>4</b>
Итоговая аттестация <i>экзамен</i>	<b>36</b>					4	<b>4</b>			<b>32</b>
<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>2</b>		<b>4</b>	<b>78</b>	<b>66</b>		<b>66</b>

Содержание разделов:

Раздел 1. Общая характеристика физических методов. Классификация методов и шкала электромагнитных волн. Единицы измерения волновых характеристик.

Раздел 2. Оптические спектры в УФ и видимой областях (электронные спектры). Симметрия состояний, молекулярные орбитали и правила отбора для электронных переходов.

Раздел 3. Фото- и рентгеноэлектронная спектроскопия. Фотоэлектронная спектроскопия как экспериментальная квантовая химия

Раздел 4. Колебательные спектры многоатомных молекул. ИК спектры и спектры КР (Раман спектры). Правила отбора для колебательных спектров.

Раздел 5. Применение ИК спектроскопии для исследования водородных связей. Межмолекулярные взаимодействия и их проявления в ИК спектрах

Раздел 6. Использование оптических спектров для количественных исследований. Законы спектрофотометрии, интегральные интенсивности, применение вторых производных для обработки спектров.

Раздел 7. Спиновые свойства ядер химических элементов, природа спектров ЯМР и их параметры. Применение спектроскопии ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  в органической химии. ЯМР на гетероядрах, Корреляционная спектроскопия ЯМР, 2D ЯМР.

Раздел 8. Принципы масс-спектрометрии, фрагментация молекул. Техника масс-спектрометрии: методы ионизации молекул, виды анализаторов масс, правила интерпретации масс-спектров. Масс-спектры некоторых классов органических соединений.

#### **6. Образовательные технологии:**

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

#### **7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):**

Конспект лекций.

#### **8. Ресурсное обеспечение:**

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### **Основная литература**

(тексты в электронном виде доступны на сайте <https://libgen.is>)

1. Л.В.Вилков, Ю.А.Пентин, Физические методы исследования в химии, М., "Высшая школа", 1987, с.5 15;
2. А.Смит, Прикладная ИК спектроскопия, М., "Мир", 1982,
3. Г.Джаффе, М.Орчин, Симметрия в химии, М., "Мир", 1967;
4. Р.Сильверстейн, Г.Басслер, Т.Моррил, Спектрометрическая идентификация органических соединений, М., "Мир", 1977, гл. 3,5;
5. Р.Сильверстейн, Ф.Вебстер, Д.Кимл, Спектрометрическая идентификация органических соединений, М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011.
6. О.В.Свердлова, Электронные спектры в органической химии, Л., "Химия" 1985, гл. 4,5;
7. Д.Браун, А.Флойд, М.Сейнзбери, Спектроскопия органических веществ, М., "Мир", 1992, гл. 2;
8. Введение в фотохимию органических соединений, ред. Г.О.Беккер, А.В.Ельцов, Л-д, "Химия", 1976;
9. А.Бейкер, Д.Беттеридж, Фотоэлектронная спектроскопия, М., "Мир", 1975;
10. Д.Граселли, М.Снейвили, Б.Балкин, Применение спектроскопии КР в химии, М., "Мир", 1984;
11. К.Накамото, ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений, М., "Мир", 1991;
12. Д.Браун, А.Флойд, М.Сейнзбери, Спектроскопия органических веществ, М., "Мир", 1992, гл. 3;
13. Водородная связь, сб., ред. Н.Д.Соколов, М., "Наука", 1981. Статья А.В.Иогансена "Инфракрасная спектроскопия и спектральное определение энергии водородной связи", с. 112-155.
14. И.Я.Берштейн, Ю.Л.Каменский, Спектрофотометрический анализ в органической химии, Л-д, "Химия", 1986;
15. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Бокаун, ЯМР в одном и двух измерениях, "Мир", М., 1990. 16. А. Т. Лебедев, Масс-спектрометрия в органической химии, Изд. ЛБЗ, М., 2003.
17. Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер. Определение строения органических соединений. М.: Мир, 2006.

### **Дополнительная литература**

1. Р.Драго, Физические методы в химии, т.1,2, М., "Мир", 1981.
2. Л.В.Вилков, Ю.А.Пентин, Физические методы исследования в химии, М., "Высшая школа", (кн. 2), 1990.
3. Л.Беллами, Инфракрасные спектры сложных молекул, М., "Мир", 1963.
4. Л.Беллами, Новые данные по инфракрасным спектрам сложных молекул, М., "Мир", 1971..
5. Э.Штерн, К.Тиммонс, Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии, М., "Мир", 1974.
6. М.В.Волькенштейн, Л.А.Грибов, М.А.Ельяшевич, Б.И.Степанов, Колебания молекул, М., "Наука", 1972;
7. Т.А.Карлссон, Фотоэлектронная и Оже спектроскопия, Л-д, "Машиностроение", 1981.
8. Р.Сильверстейн, Ф.Вебстер, Д.Кимл, Спектрометрическая идентификация органических соединений, М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011.

### **Интернет-ресурсы:**

1. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. База данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония. Режим доступа: [http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)
3. База данных масс-спектров. Режим доступа: <http://www.massbank.jp/>
4. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. На сайте химфака МГУ: [http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/tarasevich/Tarasevich\\_IR\\_tables\\_29-02-2012.pdf](http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/tarasevich/Tarasevich_IR_tables_29-02-2012.pdf)

Материально-техническое обеспечение: лекционные занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами); техникой для презентаций

**Программное обеспечение:**

1. Программное обеспечение: Aldrich/ACD Library of FT NMR Spectra.
2. Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
3. Программное обеспечение: ChemOffice со встроенным генератором спектров ЯМР.
4. Программное обеспечение: OMNIC (<https://www.intertech-corp.ru>).

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватель: Тарасевич Борис Николаевич, кхн., старший научный сотрудник

**Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

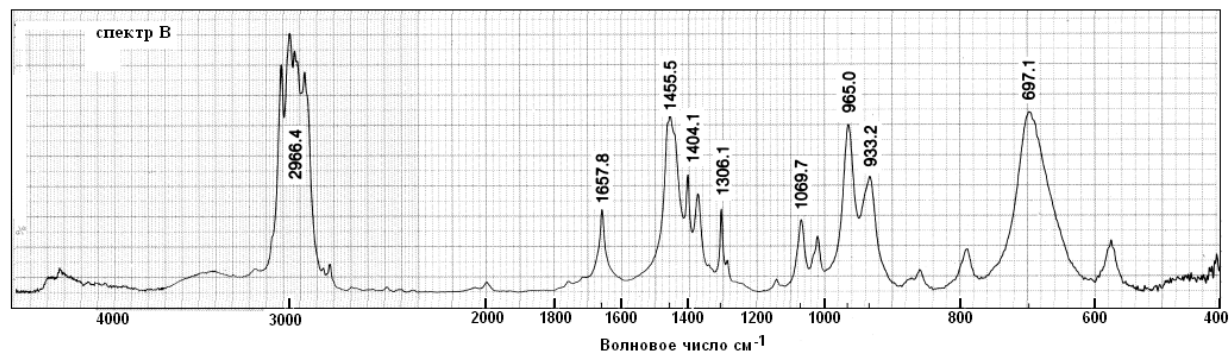
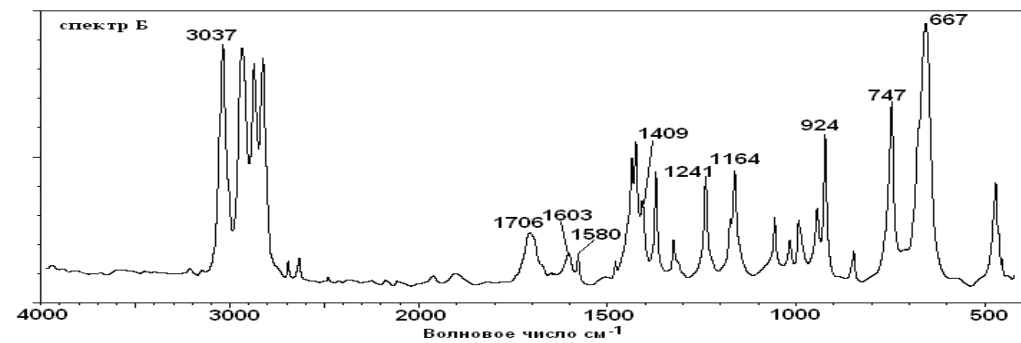
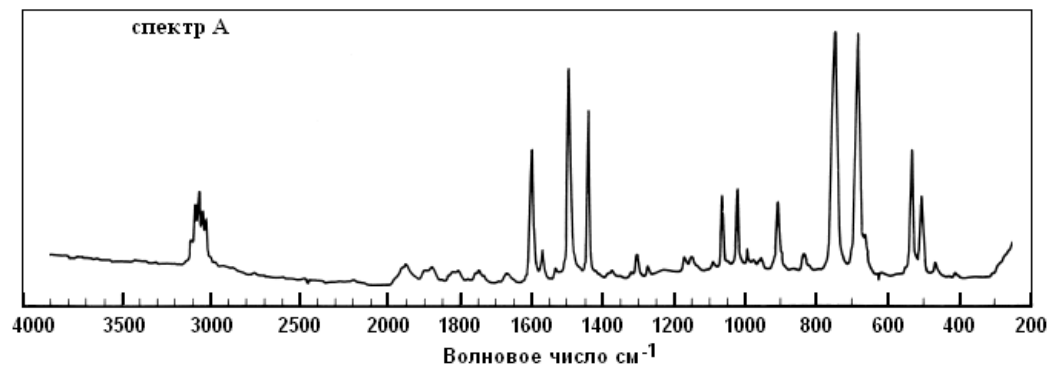
**Вопросы к экзамену:**

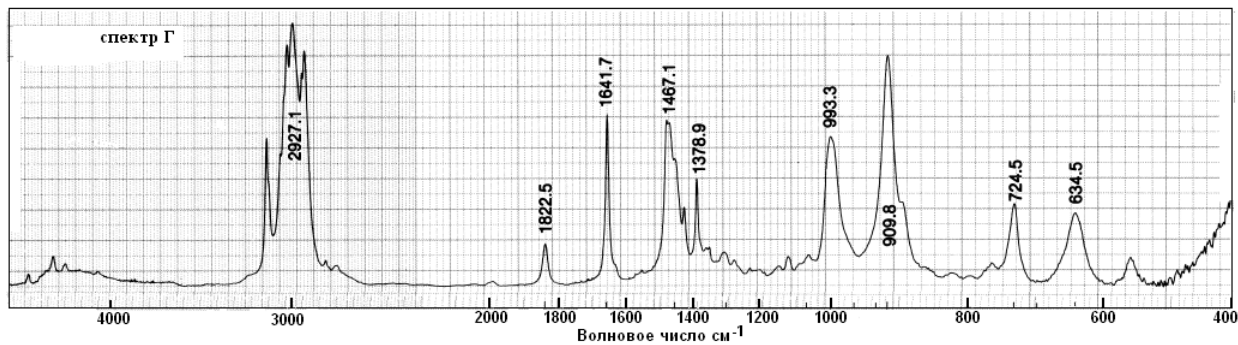
1. Молекулярная спектроскопия, как экспериментальная основа изучения строения молекул.
2. Техника приготовления проб для анализа методом ИК-спектроскопии.



3. Инфракрасные спектры двухатомных молекул, правила отбора.
4. Нормальные колебания и их типы, симметрия нормальных колебаний.
5. Природа характеристичности частот в колебательных спектрах многоатомных молекул.
6. Природа спектров люминесценции.
7. Электронные уровни энергии органических соединений, диаграмма Яблонского.
8. Понятие о хромофорных и ауксохромных группах.
9. Влияние сопряжения хромофорных групп на положение полос в электронных спектрах поглощения.
10. Эмпирические правила расчёта максимумов поглощения в электронных спектрах (правила Вудворда-Физера).
11. Применение закона Бутера-Ламберта-Бера в количественных измерениях.
12. Во сколько раз уменьшится интенсивность излучения, прошедшего через кювету с поглощающим веществом  $I$ , по сравнению с интенсивностью падающего света  $I_0$ , если концентрация вещества равна  $2 \times 10^{-3}$  моль/л, толщина поглощающего слоя 5 мм, а молярный коэффициент поглощения равен  $10^3$  л/моль см?
13. От каких параметров кюветы с поглощающим веществом и луча пучка излучения зависит величина пропускания? 1) от толщины поглощающего слоя и поперечного сечения луча, 2) только от толщины поглощающего слоя, 3) только от поперечного сечения луча, 4) от освещаемого объёма образца.
14. Длина волны, при которой проявляются симметричные валентные колебания C-H в метане составляет 3,427 мкм. Оцените волновые числа (в  $\text{см}^{-1}$ , в гармоническом приближении) валентных колебаний C-D и C-T в изотопзамещённых молекулах  $\text{CD}_4$  и  $\text{CT}_4$ .
15. «Нормальная» частота валентных колебаний группы O-H (при отсутствии водородных связей) имеет величину около  $3600 \text{ см}^{-1}$ . Оцените величины частот валентных колебаний для групп O-D и S-H. Объясните, почему экспериментальные величины этих частот -  $2670\text{-}2790 \text{ см}^{-1}$  для O-D и  $2614\text{-}2625 \text{ см}^{-1}$  для S-H находятся в одном спектральном диапазоне?
16. Требования к пробоподготовке в спектроскопии ЯМР ( $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ ).
17. Характеристики спектров ЯМР: химические сдвиги, интенсивности, константы спин-спинового взаимодействия.
18. Шакаы ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ . Химические сдвиги, стандарты, интегральные интенсивности.
19. Характеристичность сигналов в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ .
20. Спин-спиновое взаимодействие, константы ССВ, мультиплетность сигналов.
21. Химическая и магнитная эквивалентность ядер.
22. Номенклатура спиновых систем.
23. Стандарты в  $^1\text{H}$  ЯМР.
24. Стандарты в  $^{13}\text{C}$  ЯМР.
25. Стандарты в  $^{19}\text{F}$  ЯМР.
26. Одномерные экспериментальные методы спектроскопии  $^{13}\text{C}$ -ЯМР.
27. Одномерные экспериментальные методы спектроскопии  $^1\text{H}$ -ЯМР.

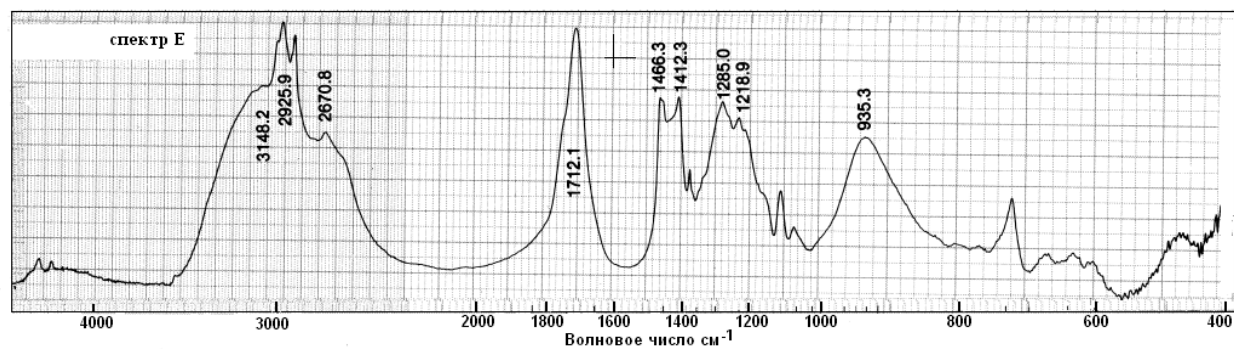
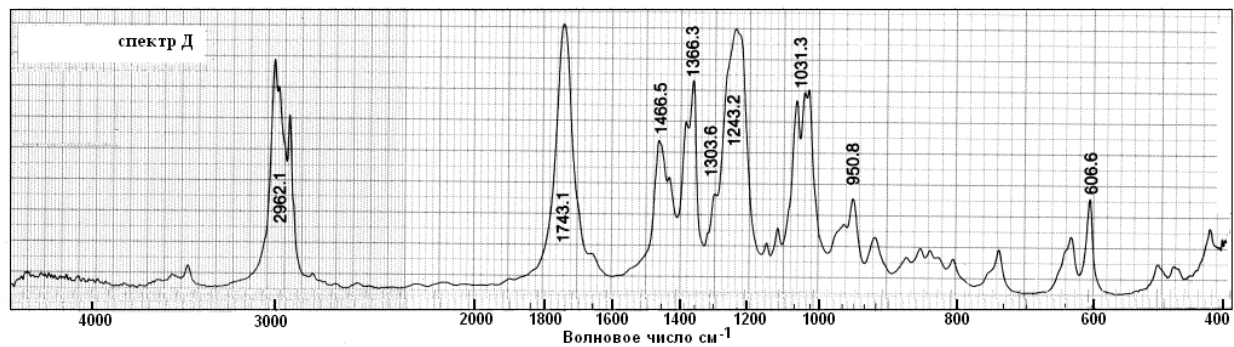
28. Двумерные экспериментальные методы спектроскопии  $^{13}\text{C}$ -ЯМР
29. Двумерные экспериментальные методы спектроскопии  $^1\text{H}$ -ЯМР.
30. Ядерный эффект Оверхаузера.
31. Механизмы релаксации.
32. Расчет химического сдвига сигналов в замещенных бензолах.
33. Принцип действия масс-спектрометра. Разрешение и другие характеристики масс-спектрометра.
34. Информация о структуре молекул, получаемая масс-спектрометрическими методами.
35. Методы анализа вещества в масс-спектрометрии: способы ввода образца, способы ионизации и способы представления результатов.
36. Хромато-масс-спектрометрия. Информация, получаемая методами хромато-масс-спектрометрии. Аппаратное оформление метода: соединение хроматографа и масс-спектрометра.
37. Типы ионов в масс-спектре с ионизацией электронным ударом.
38. Молекулярный ион. Изотопные пики. Способ определения брутто-формулы соединения по анализу группы пиков молекулярного иона.
39. Масс-спектрометрия высокого разрешения.
40. Фрагментация органических соединений. Закономерности фрагментации. Гомологические серии пиков ионов основных классов простых органических соединений.
41. Перегруппировочные процессы. Перегруппировка Мак-Лафферти.
42. Качественный масс-спектрометрический анализ. Базы данных по масс-спектрометрии.
43. Каким соединениям соответствуют следующие ИК спектры (А-Г):  
Дифенилацетилену, циклогексадиену-1,3, октену-1, транс-пентену-2. При решении этой и следующих задач наряду с таблицами отнесений рекомендуется использовать сайт <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/>.

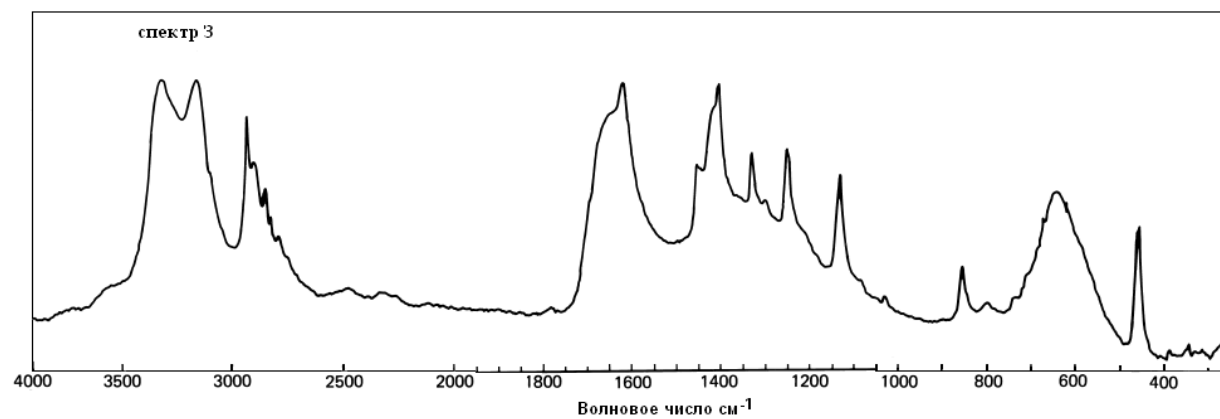
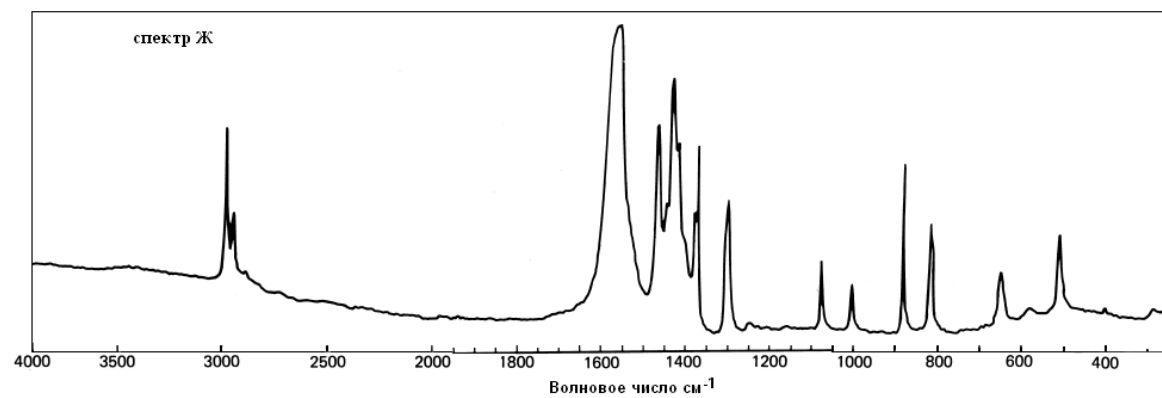


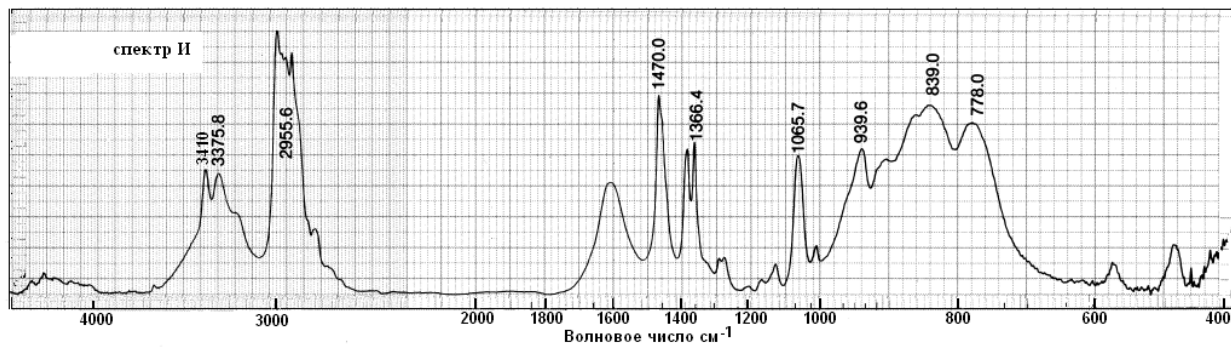


44. Каким соединениям соответствуют следующие ИК спектры (Д-И)?

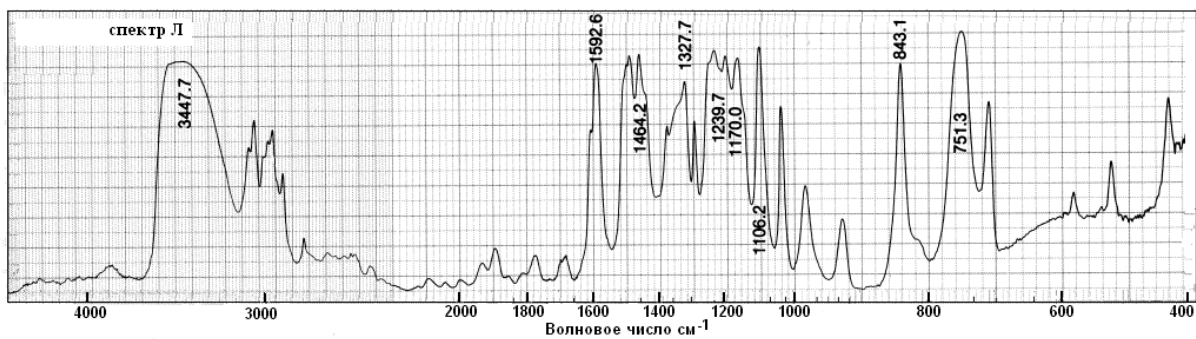
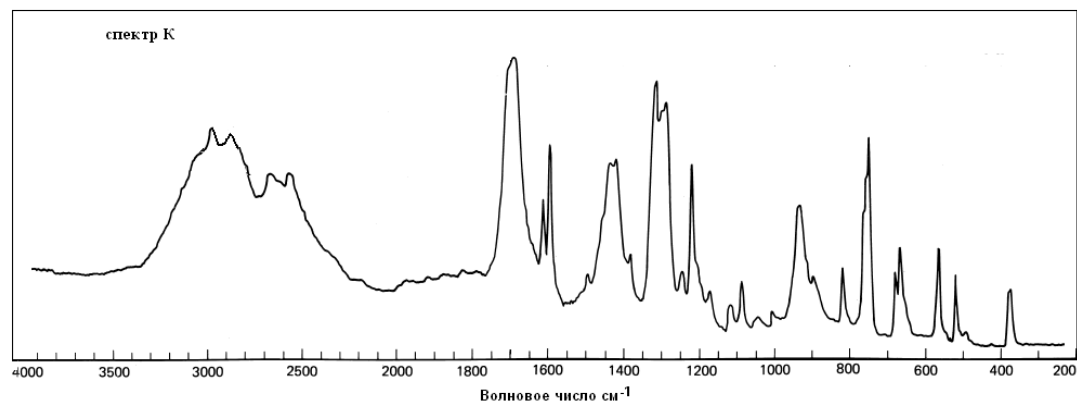
Амиду масляной кислоты, изобутиламину, додекановой кислоте, пропионату натрия, бутиловому эфиру уксусной кислоты.

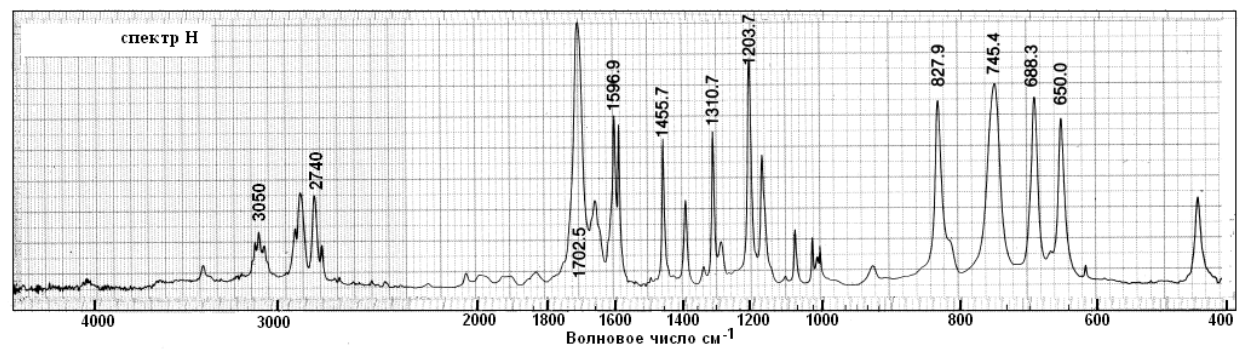
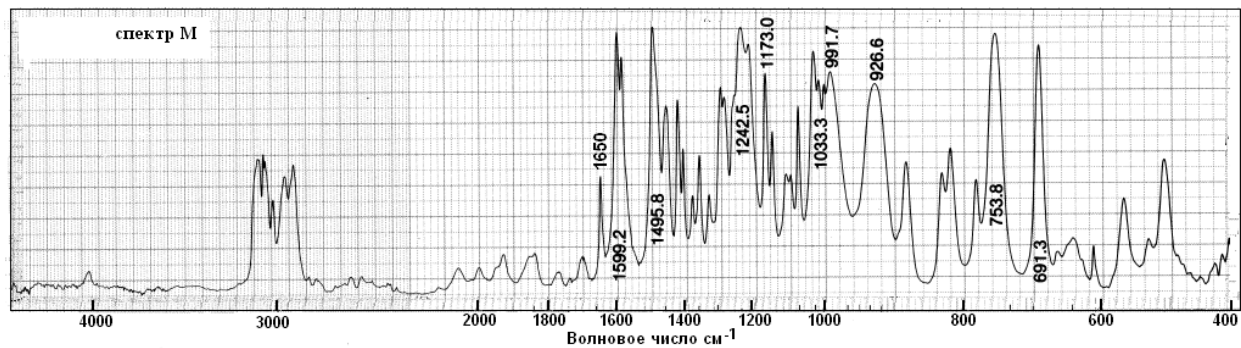




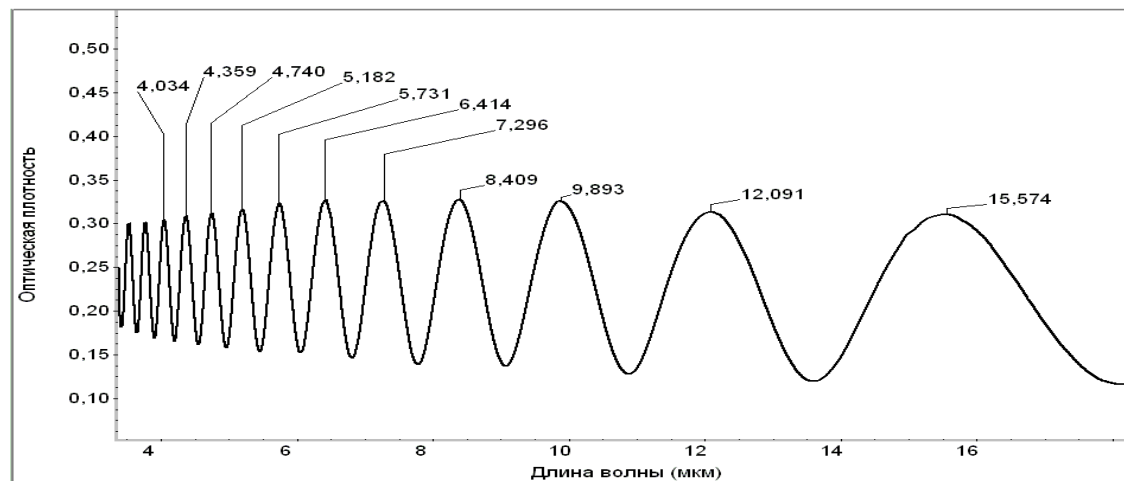


45. Каким соединениям соответствуют следующие ИК спектры (К-Н)? Аллилфениловому эфиру, бензальдегиду, о-крезолу, м-метилбензойной кислоте.





46. На рис. показана интерференционная картина, возникающая при регистрации ИК спектра пустой кюветы из KRS-5. Определить толщину этой кюветы.



47. Оцените глубину проникновения (в мкм) ИК излучения в образец полиэтилена в условиях спектроскопии внутреннего отражения для волнового числа  $1000 \text{ см}^{-1}$ .

Показатель преломления полиэтилена имеет величину в ИК области около 1,540, угол падения луча из селенида цинка на границу раздела составляет  $65^\circ$ .

### Задачи

Задача № 1.



По данным элементного анализа органическое соединение состоит из углерода – 57,69%, водорода – 5,77%, азота – 13,46%, пик молекулярного однозарядного иона в масс-спектре 208 Да. На рисунках 1-1, 1-2, 1-3 показаны ИК и ЯМР спектры этого соединения. На основании приведённых данных определите структурную формулу молекулы этого соединения.

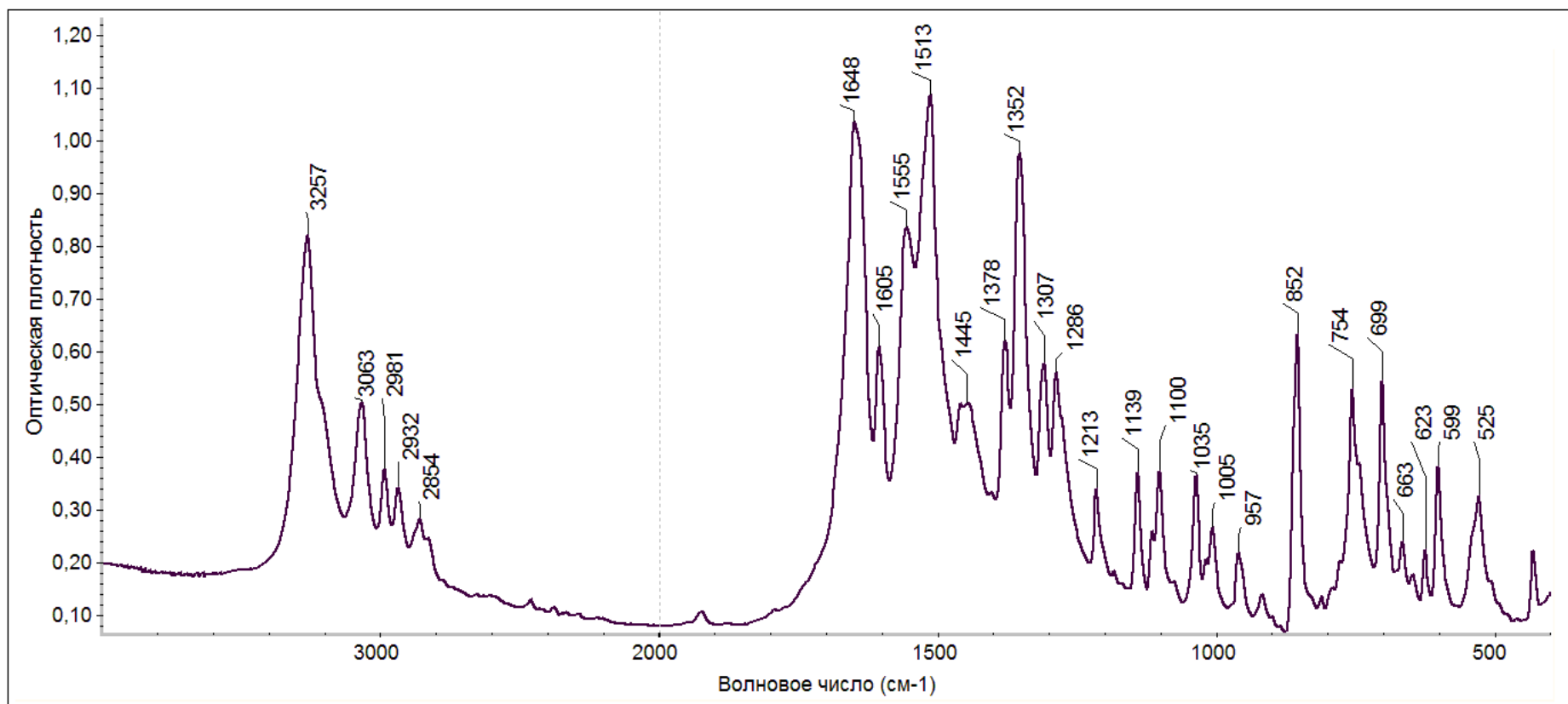


Рис. 1-1. ИК спектр соединения 1, таблетка в KBr.

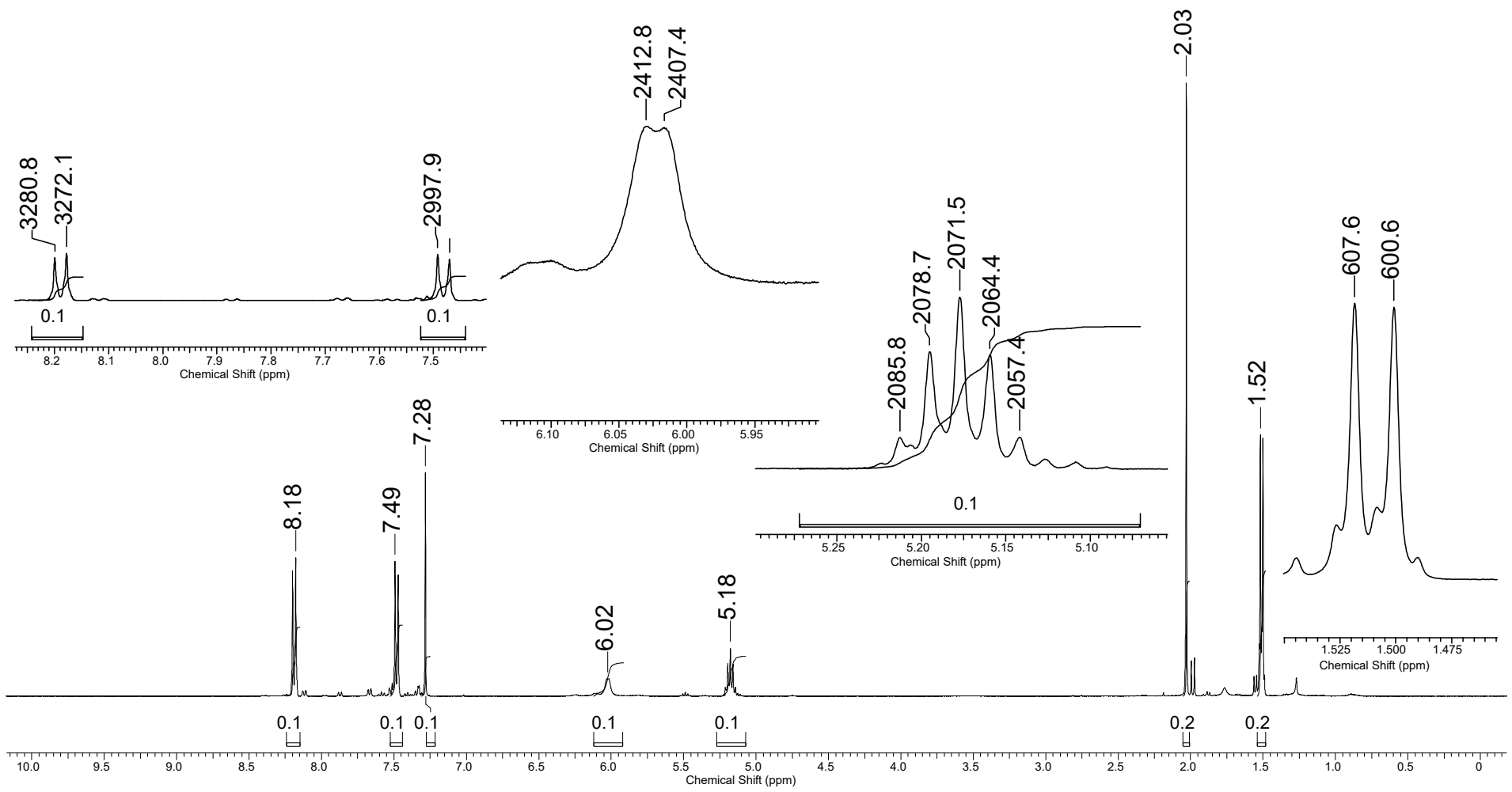


Рис. 1-2. Спектр ПМР соединения 1, раствор в дейтерохлороформе.

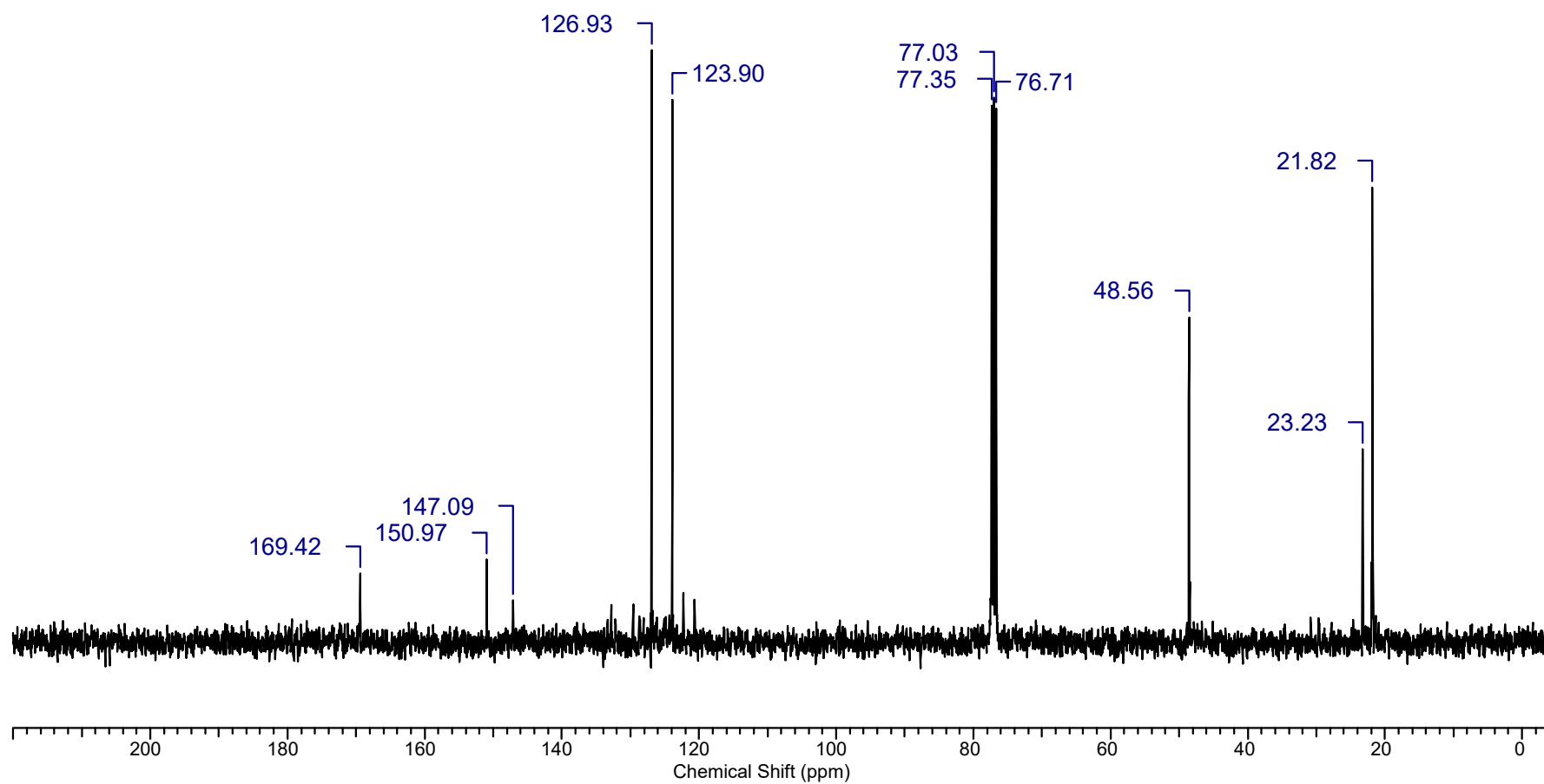


Рис. 1-3. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединения 1, раствор в дейтерохлороформе.

### Задача № 2.

По данным элементного анализа органическое соединение состоит из углерода – 82,05%, водорода – 5,98%, азота – 11,96%, пик молекулярного однозарядного иона в масс-спектре 238 Да. В качестве исходного соединения для его синтеза используют в числе других реагентов производное малеиновой кислоты. На рисунках 2-1, 2-2, 2-3 показаны ИК и ЯМР спектры этого соединения. На основании приведённых данных определите структурную формулу молекулы этого соединения.

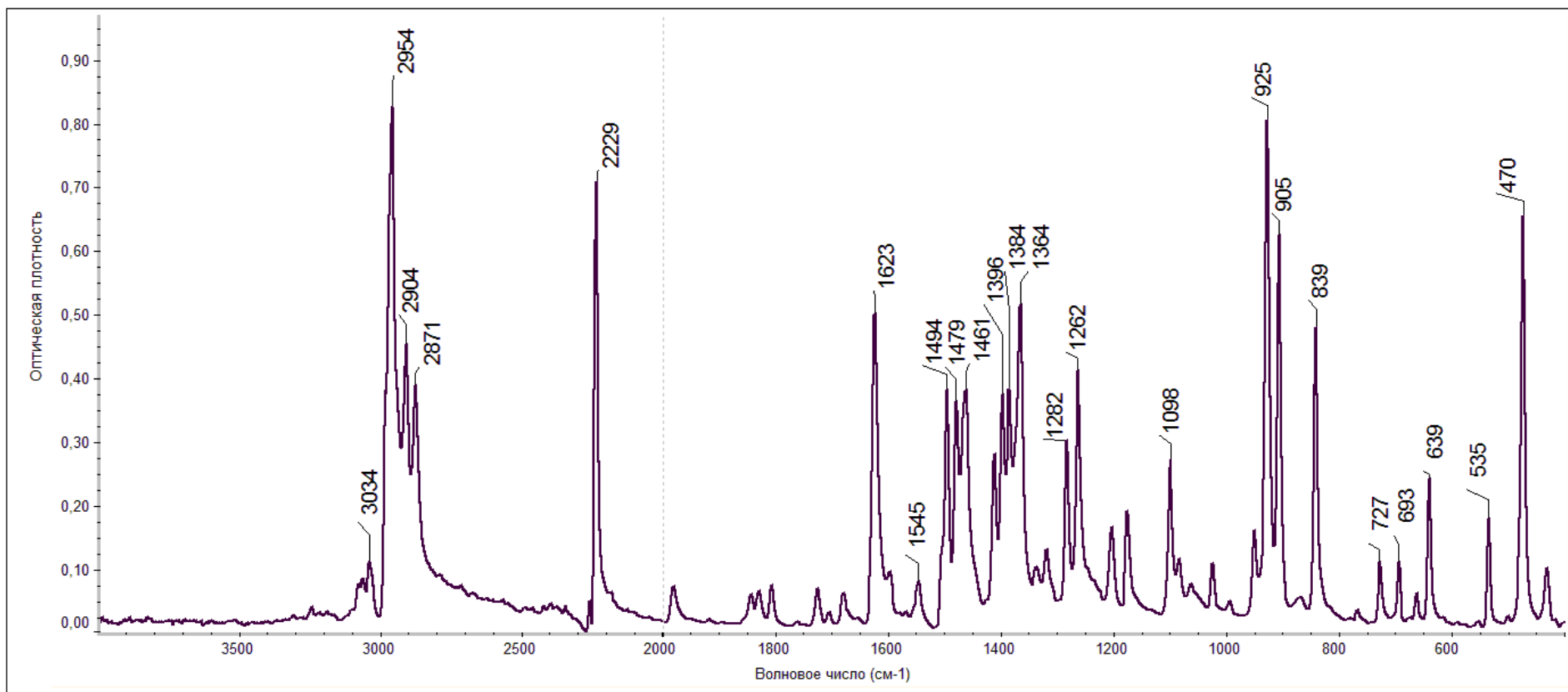


Рис. 2-1. ИК спектр соединения 2, таблетка в КВг.

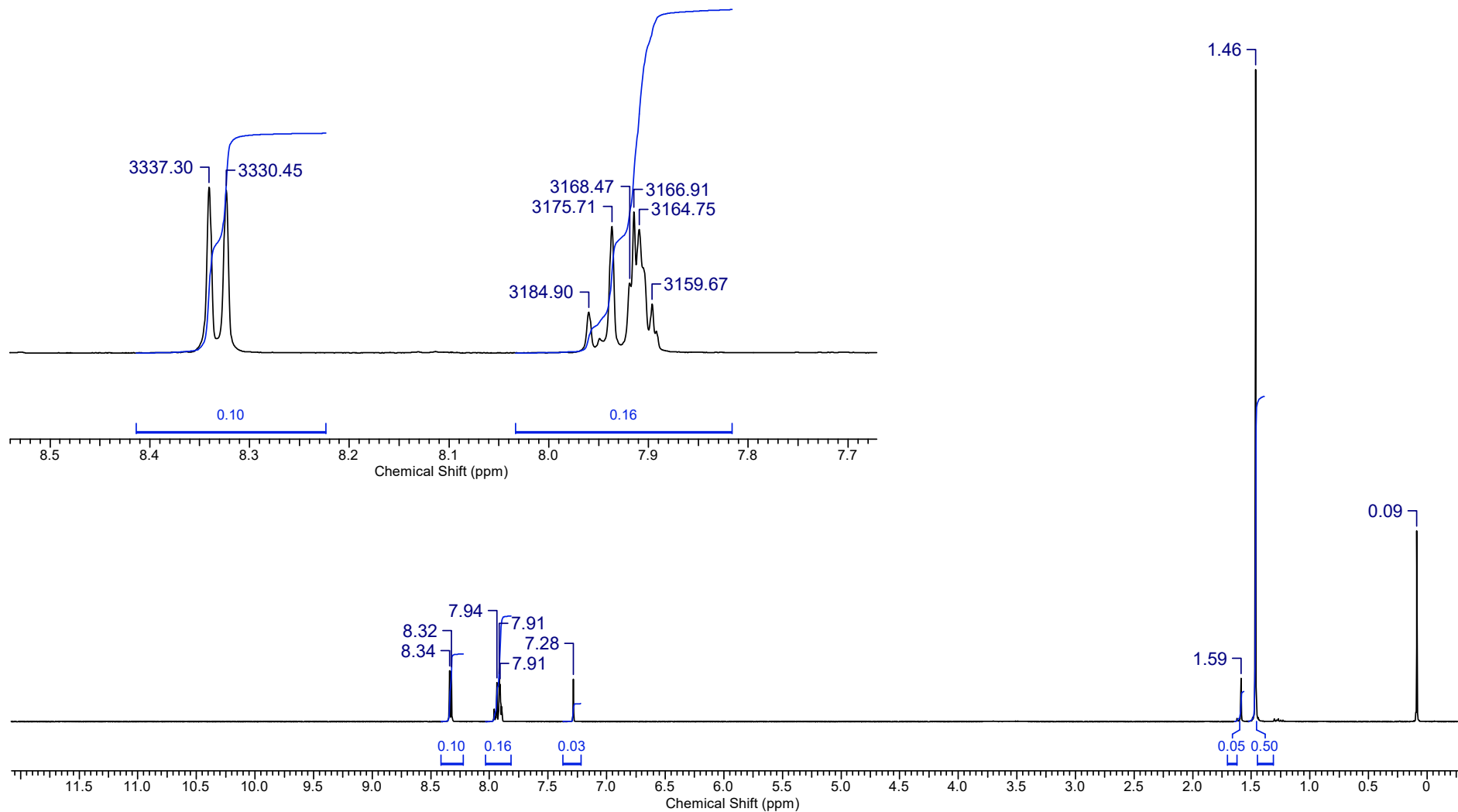


Рис. 2-2. Спектр ПМР соединения 2, раствор в дейтерохлороформе.

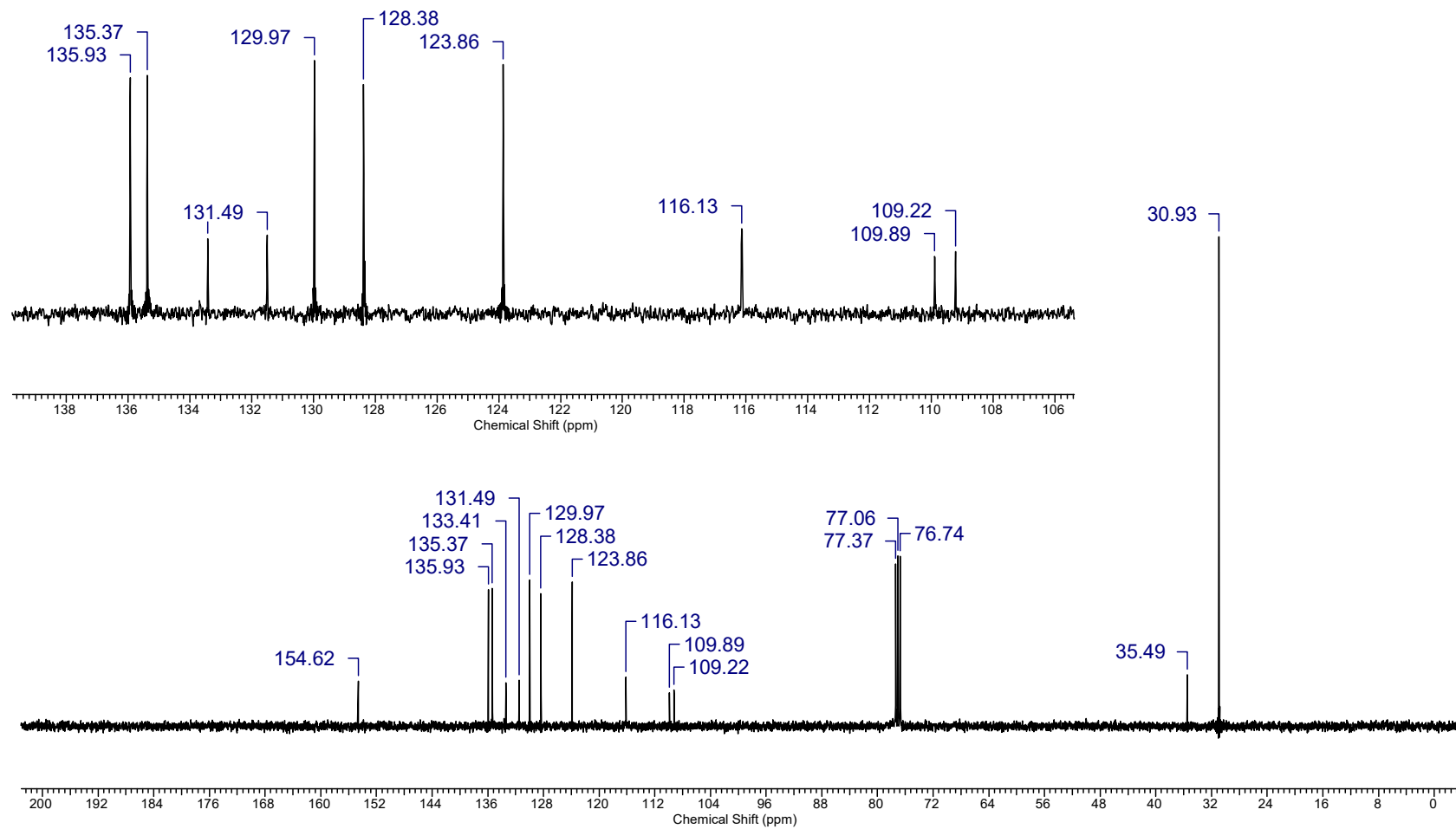


Рис. 2-3. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединения 2, раствор в дейтерохлороформе.

Задача № 3.

По данным элементного анализа органическое соединение состоит из углерода – 69,84%, водорода – 5,82%, азота – 7,41%, пик молекулярного однозарядного иона в масс-спектре 189 Да. На рисунках 3-1, 3-2, 3-3 показаны ИК и ЯМР спектры этого соединения. На основании приведённых данных определите структурную формулу молекулы этого соединения.

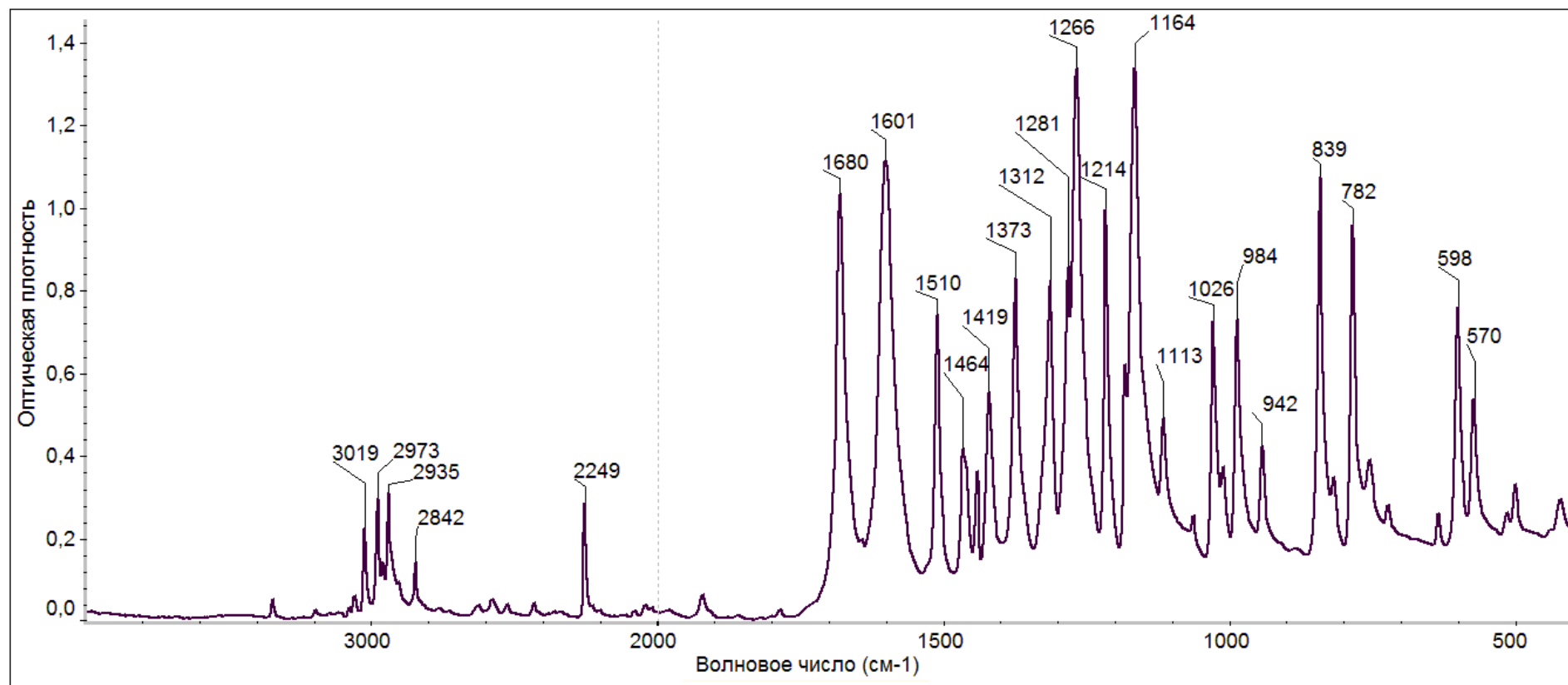


Рис. 3-1. ИК спектр соединения 3, таблетка в KBr.

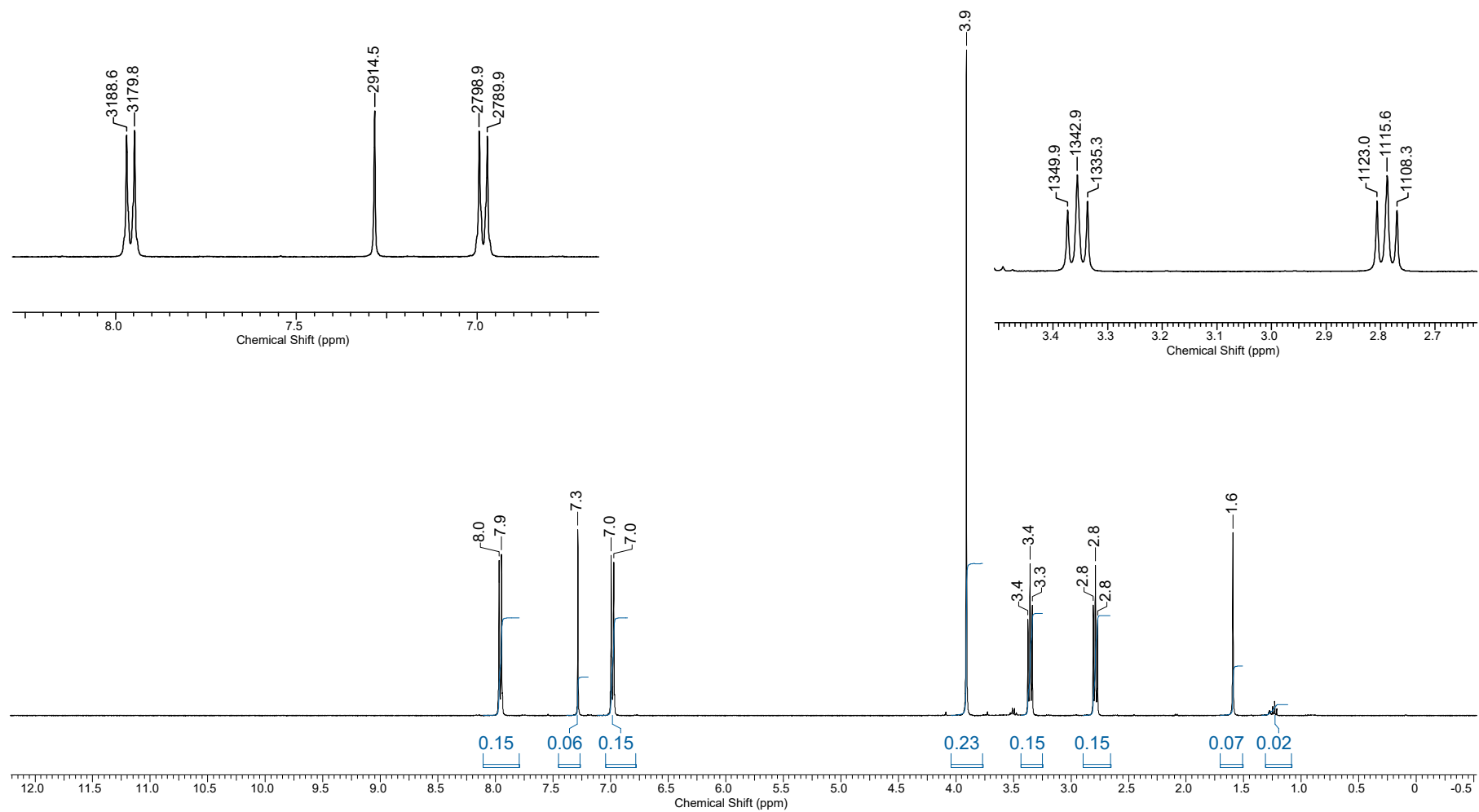


Рис. 3-2. Спектр ПМР соединения 3, раствор в дейтерохлороформе.



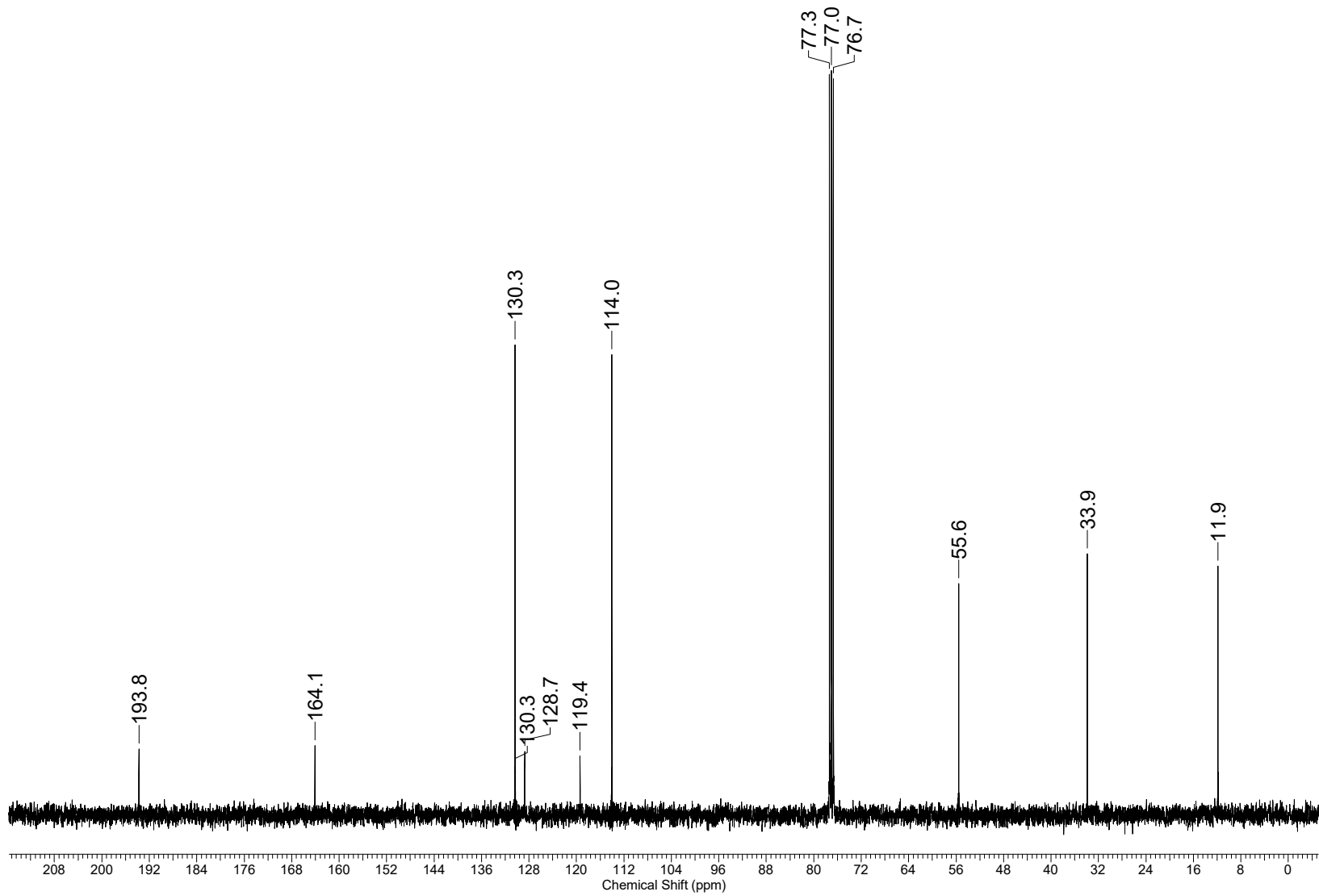


Рис. 3-3. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединения 3, раствор в дейтерохлороформе.

#### Задача № 4.

По данным элементного анализа органическое соединение состоит из углерода – 72,36%, водорода – 4,52%, азота – 7,03%. На рисунках 4-1, 4-2, 4-3, 4-4 показаны ИК, ЯМР и масс-спектры этого соединения. На основании приведённых данных определите структурную формулу молекулы неизвестного соединения.

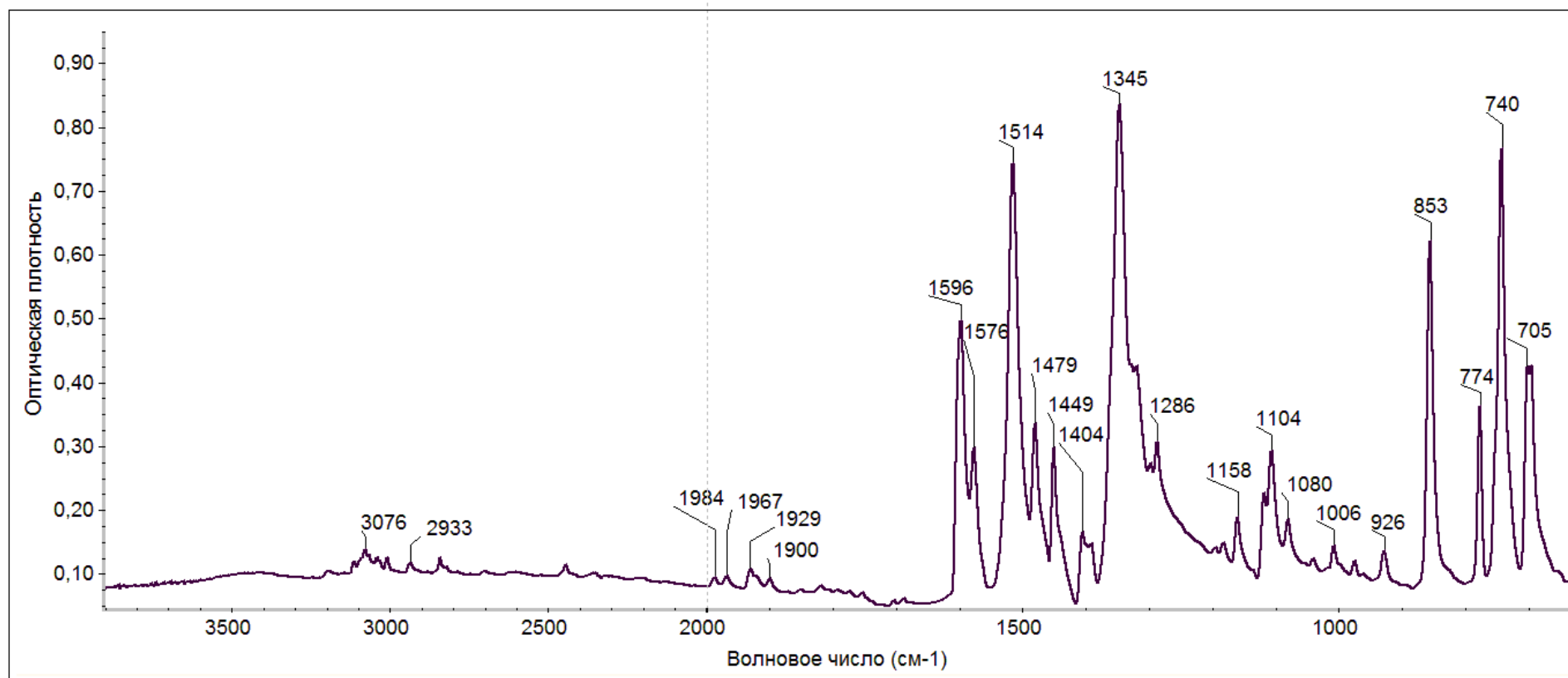


Рис. 4-1. ИК спектр соединения 4, таблетка в KBr.

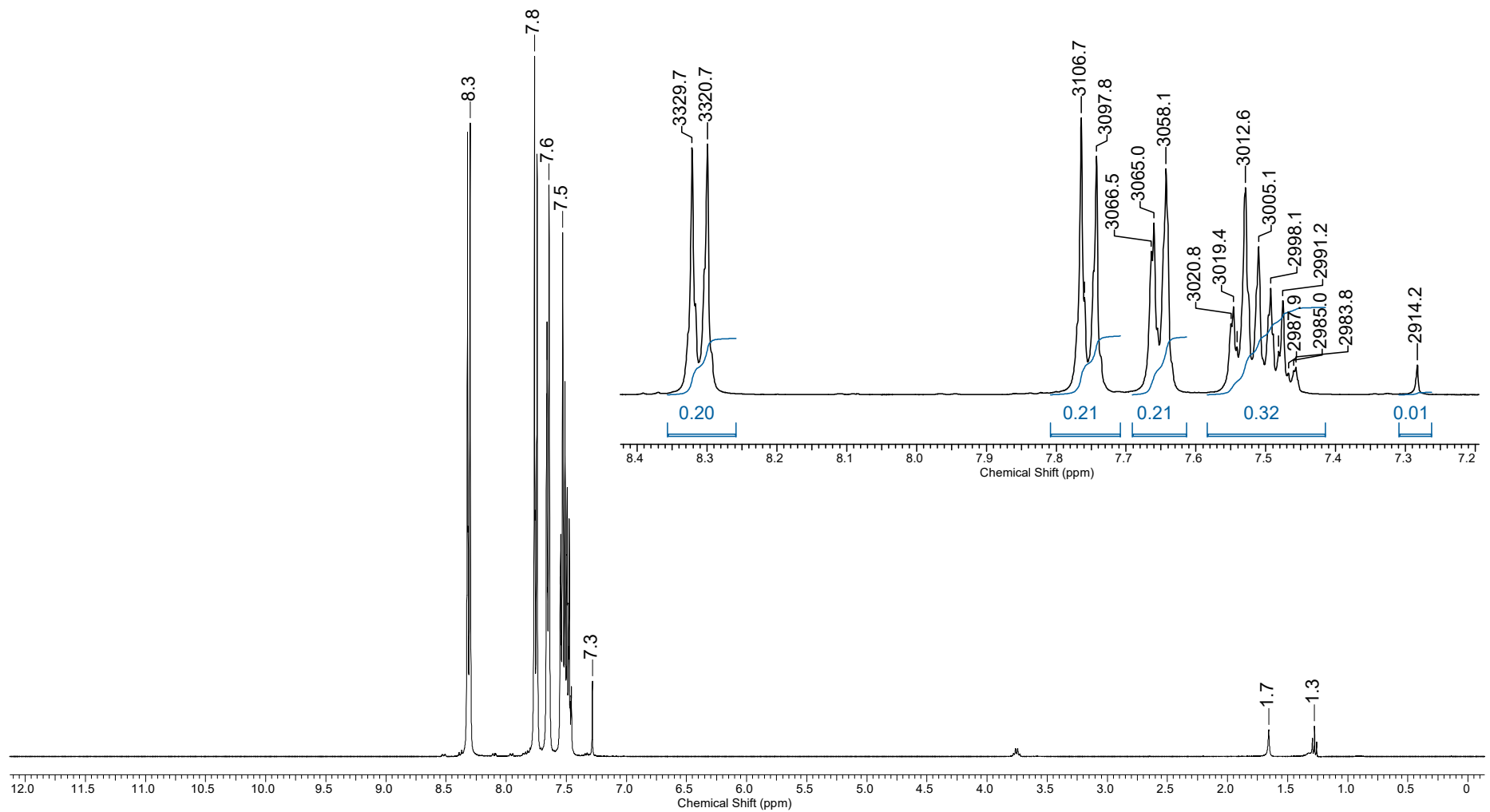


Рис. 4-2. Спектр ПМР соединения 4, раствор в дейтерохлороформе.

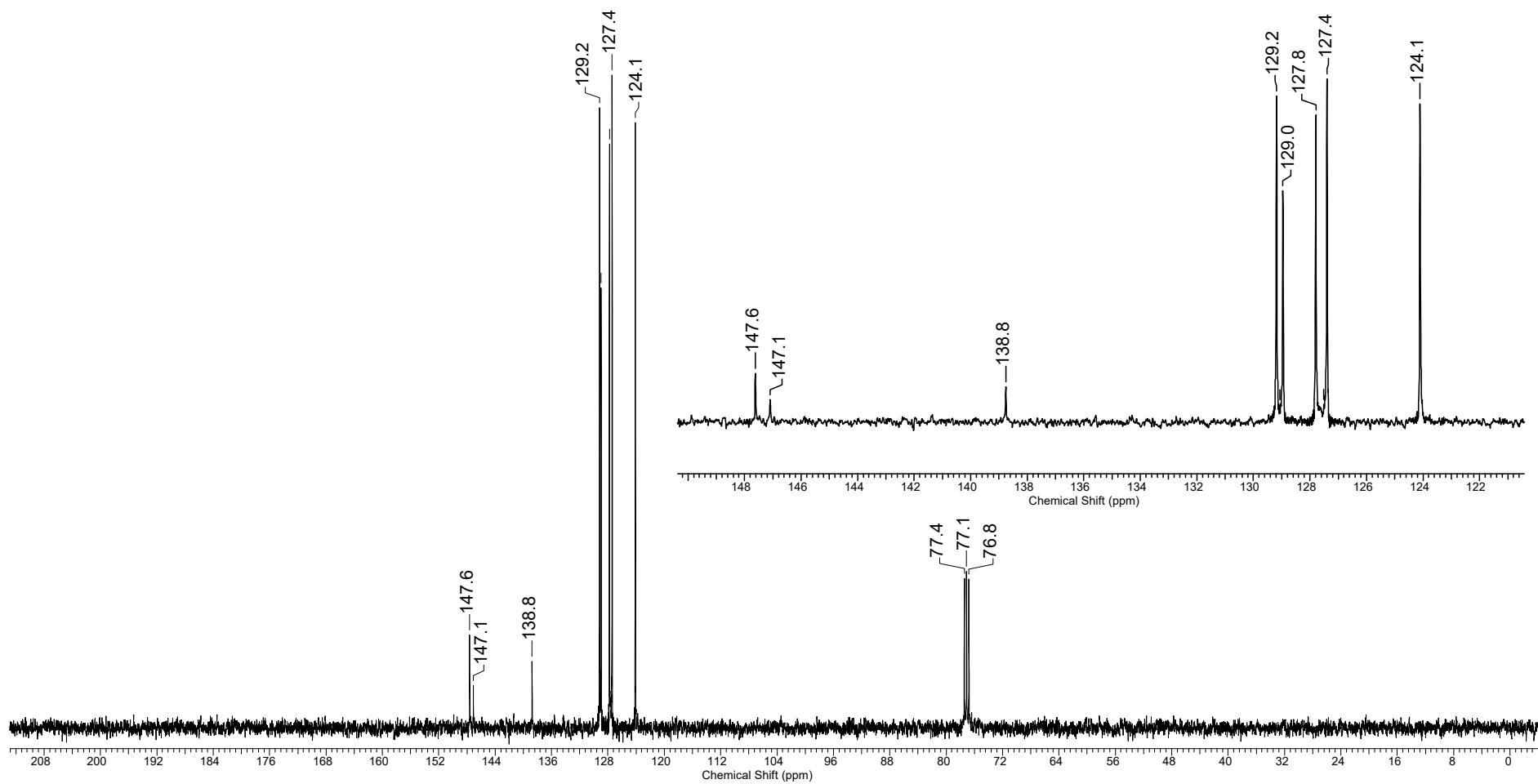


Рис. 4-3. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединения 4, раствор в дейтерохлороформе.

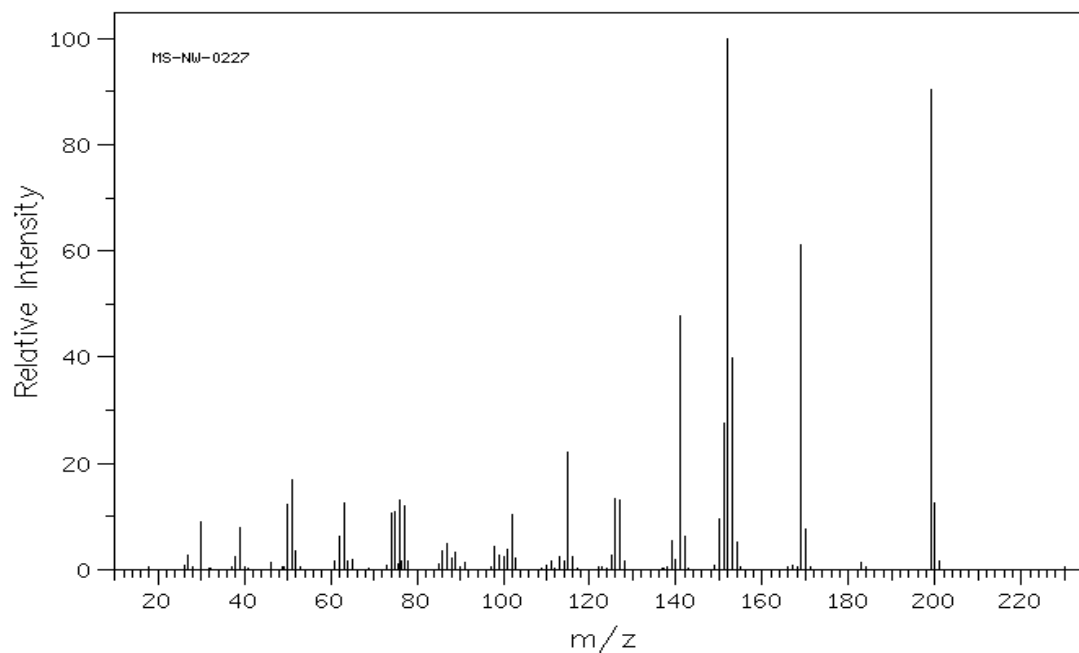


Рис. 4-4а. Масс-спектр соединения 4, графическое представление.

<b>m/e</b>	<b>Интенсивность%</b>	<b>m/e</b>	<b>Интенсивность%</b>	<b>m/e</b>	<b>Интенсивность%</b>	<b>m/e</b>	<b>Интенсивность%</b>	<b>m/e</b>	<b>Интенсивность%</b>
27.0	2.6	65.0	1.8	88.0	2.1	114.0	1.6	150.0	9.5
30.0	9.1	74.0	10.7	89.0	3.3	115.0	22.0	151.0	27.5
38.0	2.5	75.0	11.0	91.0	1.4	116.0	2.3	152.0	100.0
39.0	7.9	75.5	1.0	98.0	4.4	125.0	2.7	153.0	39.8
46.0	1.3	76.0	13.2	99.0	2.8	126.0	13.4	154.0	5.1
50.0	12.3	76.5	1.5	100.0	2.3	127.0	13.2	169.0	61.3
51.0	16.9	77.0	11.9	101.0	3.8	128.0	1.6	170.0	7.5
52.0	3.5	78.0	1.5	102.0	10.4	139.0	5.3	183.0	1.4
61.0	1.6	85.0	1.1	103.0	2.2	140.0	1.8	199.0	90.3
62.0	6.3	86.0	3.5	111.0	1.5	141.0	47.9	200.0	12.4
63.0	12.6	87.0	5.0	113.0	2.4	142.0	6.2	201.0	1.5
64.0	1.6								

Рис. 4-4б. Масс-спектр соединения 4, табличное представление.

Задача № 5.

По данным элементного анализа органическое соединение содержит углерод – 58,06% и водород – 4,30%. На рисунках 5-1, 5-2, 5-3, 5-4 показаны ИК, ЯМР и масс- спектры этого соединения. На основании приведённых данных определите структурную формулу молекулы неизвестного соединения.

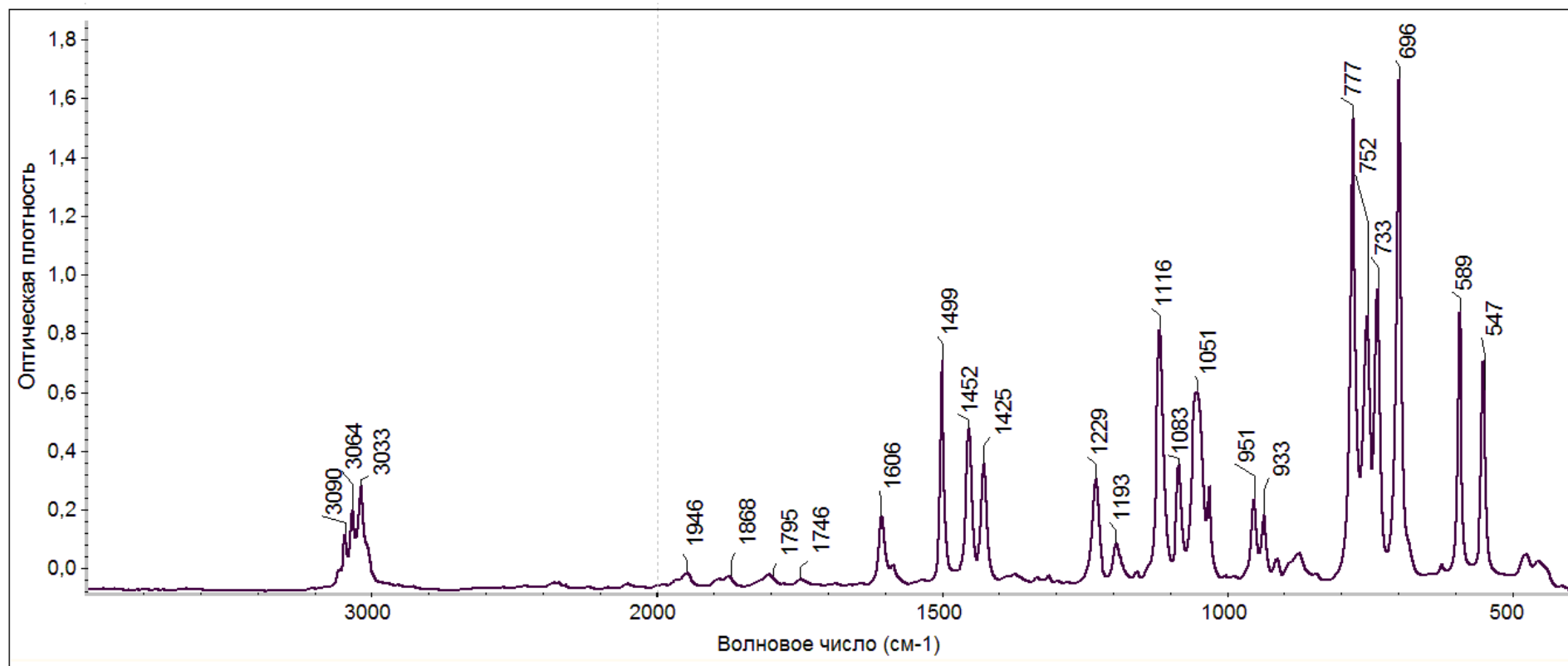


Рис. 5-1. ИК спектр соединения 5, таблетка в KBr.

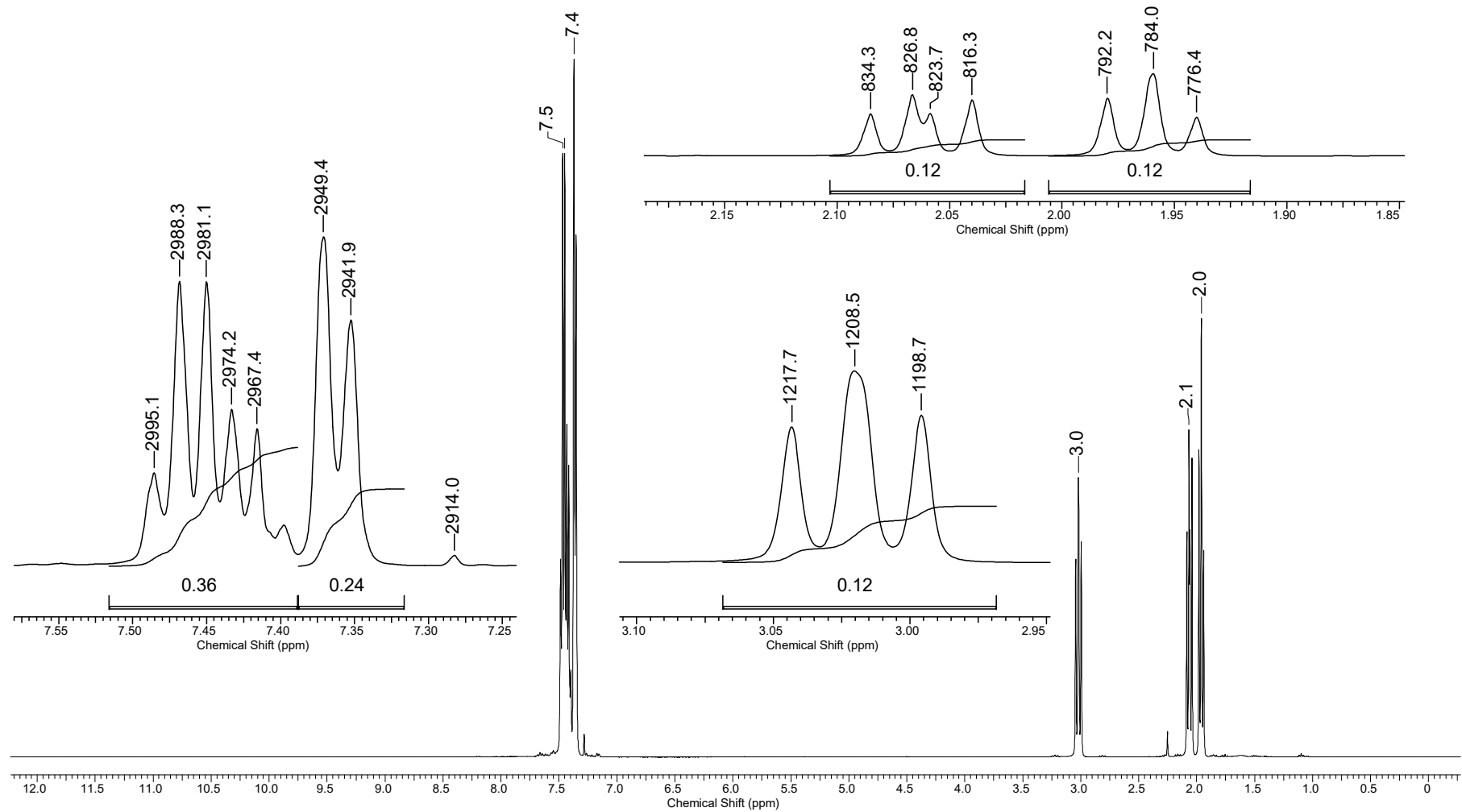


Рис. 5-2. Спектр ПМР соединения 5, раствор в дейтерохлороформе.

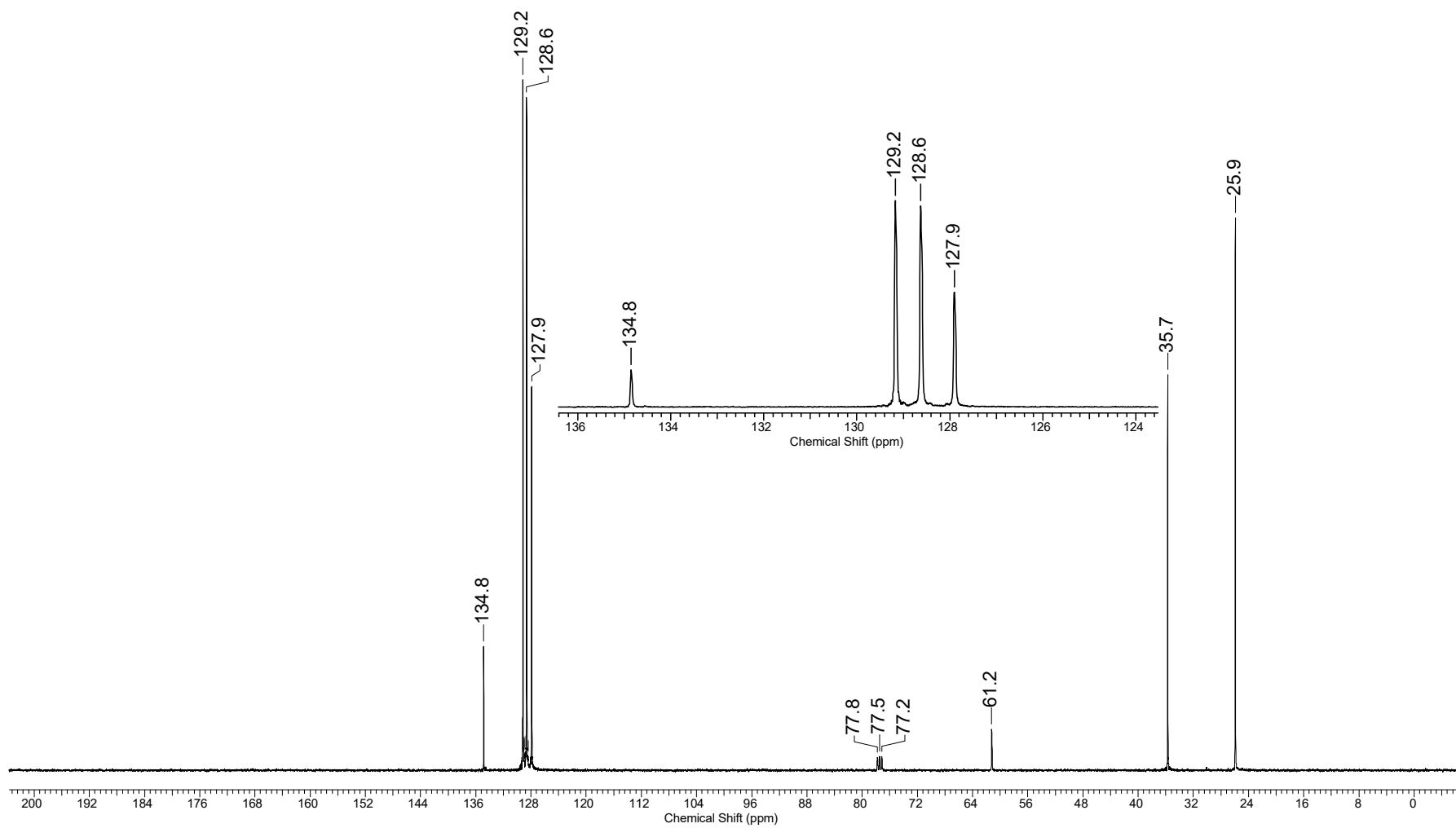
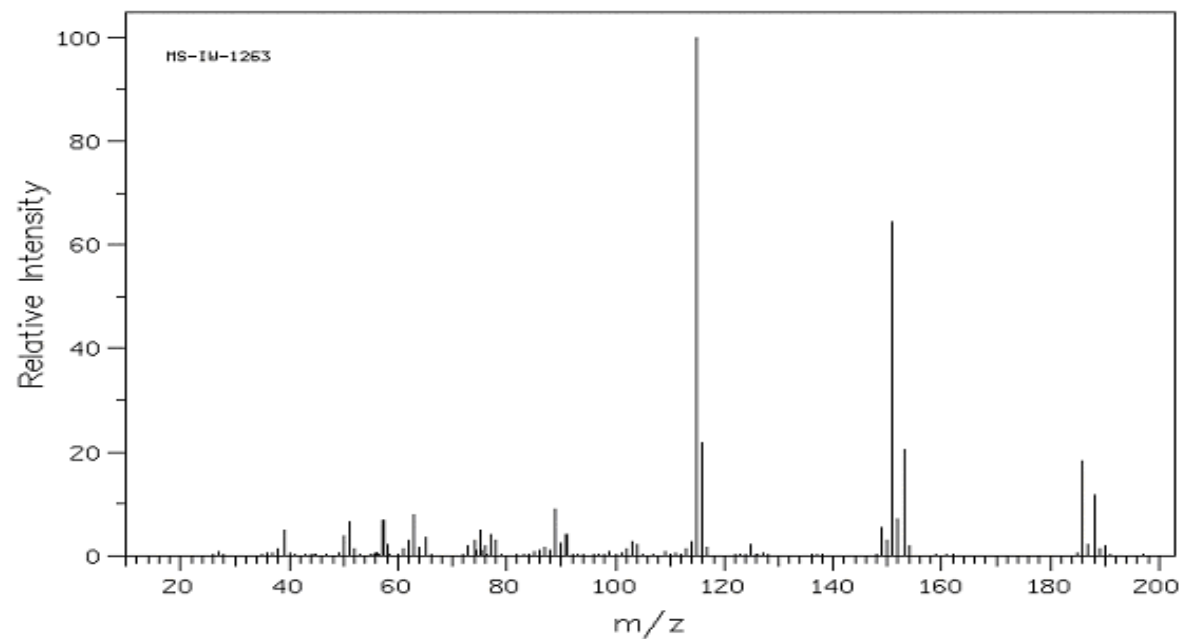


Рис. 5-3. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединения 5, раствор в дейтерохлороформе.





m/e	Интенсивность	m/e	Интенсивность	m/e	Интенсивность	m/e	Интенсивность
38.0	1.2	64.0	1.5	88.0	1.0	125.0	2.1
39.0	5.0	65.0	3.5	89.0	9.0	149.0	5.3
50.0	3.7	73.0	1.8	90.0	2.5	150.0	3.1
51.0	6.4	74.0	2.9	91.0	4.0	151.0	64.5
52.0	1.2	74.5	1.1	102.0	1.3	152.0	7.2
57.0	6.9	75.0	5.0	103.0	2.7	153.0	20.4
57.5	6.7	75.5	1.0	104.0	2.1	154.0	2.0
58.0	2.2	76.0	1.9	113.0	1.4	186.0	18.2
61.0	1.2	77.0	4.0	114.0	2.6	187.0	1.8
62.0	3.0	78.0	3.0	115.0	100.0	188.0	11.8
63.0	7.8	86.0	1.1	116.0	21.7	189.0	1.2
		87.0	1.6	117.0	1.6	190.0	1.9

Рис. 5-4. Масс-спектр соединения 5, в графическом и табличном представлениях.

**Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
<b>Оценка \ Результат</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
<b>Знания</b>	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
<b>Умения</b>	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности неприципиального характера)	Успешное и систематическое умение
<b>Навыки (владения)</b>	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<b>знать:</b> ключевые закономерности структурного и электронного строения разных классов органических соединений; методы их анализа с использованием физических методов и понимать связь их строения и различных спектров.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
<b>уметь:</b> использовать основные закономерности структурного и электронного строения разных классов органических соединений; для выполнения анализа их структур и построения структурных формул.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
<b>владеть:</b> навыками использования основных методических подходов к анализу структуры органических соединений на основе использования ЯМР, ИК, масс-спектров, электронных спектров и литературных данных. Владеть навыками работы с соответствующими программными продуктами.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене