

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ
«НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ПО ИЗЫСКАНИЮ НОВЫХ
АНТИБИОТИКОВ
имени Г.Ф. ГАУЗЕ»
(ФГБНУ «НИИНА»)**



«УТВЕРЖДАЮ» Директор
ФГБНУ «НИИНА», профессор РАН

А.Е. Щекотихин

2018 г

Рабочая программа

**подготовки научно-педагогических кадров высшей квалификации
по дисциплине**

СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

(программа по выбору)

подготовки научно-педагогических кадров высшей квалификации по направлению
подготовки 06.06.01 **БИОЛОГИЧЕСКИЕ НАУКИ** Направленность (профиль) 03.01.06
Биотехнология (в том числе бионанотехнологии)

Трудоемкость дисциплины 5 зачетных единиц

Москва-2018

Направление подготовки: 06.06.01 - БИОЛОГИЧЕСКИЕ НАУКИ
Научная специальность: 03.01.06 - BIOTEХНОЛОГИЯ

Цикл дисциплин (по учебному плану): **Б.1.В.ДВ.1.**

Курс:

Трудоёмкость 5 зачетные единицы

Трудоёмкость 180 часов

Количество аудиторных часов на дисциплину: 54 часа

В том числе:

Лекции: 36 часов

Практические и семинарские занятия: 18 часов

Количество часов на самостоятельную работу: 126 часов

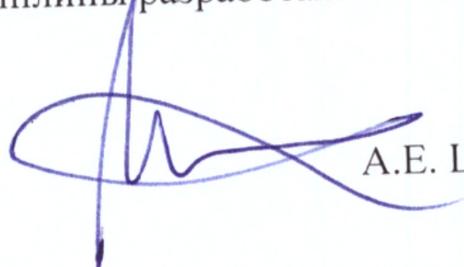
Рабочая программа дисциплины **Б.1.В.ДВ.2.** «Спектральные методы исследования органических соединений» составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки кадров высшей квалификации 03.00.00 - БИОЛОГИЧЕСКИЕ НАУКИ

Рабочая программа дисциплины разработана ФГБНУ «НИИНА им. Г.Ф. Гаузе»

Рабочая программа дисциплины разработана ФГБНУ «НИИНА»

Разработчик:

д.х.н., профессор РАН



А.Е. Щекотихин

Рецензент:

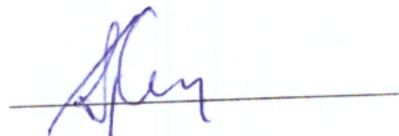
д.х.н.

А.М.Королев

Принята на заседании Ученого совета ФГБНУ «НИИНА»

« 17 » сентября 2018 г., протокол № 7

Заведующий аспирантурой



В.И. Пономаренко

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины: Формирование компетенций в области основных спектральных методов установления состава и строения органических соединений, формирование навыков к самостоятельной работе с приборной и аналитической базой физико-химических методов анализа, компьютерным парком и базами данных.

Задачи дисциплины:

- Сформировать базовые знания об инструментальных методах химического анализа необходимые для выполнения научно-исследовательской работы.
- Ознакомить обучающихся с основами важнейших современных физико-химических методов анализа.
- Рассмотреть основные экспериментальные закономерности физико-химических методов исследования и установления структуры органических соединений;
- Сформировать у обучающихся навыки и умения расшифровки спектров (УФ, ИК- ЯМР, масс-) органических и элементоорганических соединений, установления строения соединений по совокупности их спектров.
- Обеспечить овладение методологией применения физико-химических методов исследований в биоорганической химии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Настоящая дисциплина «Спектральные методы исследования органических соединений» - модуль основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки по специальности 02.00.10 «Биоорганическая химия», а также по направлению 30.06.01 - Фундаментальная медицина по специальности 14.03.07 – Химиотерапия и антибиотики. Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления по органической и физической химии. Для изучения данной дисциплины необходимо высшее образование с освоением курсов органической и физической химии для химических специальностей.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

- Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в биорганической химии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

Профессиональные компетенции:

- обладание представлениями о системе фундаментальных химических понятий способностью использовать научную методологию исследования: знания современных теоретических и экспериментальных методов исследования с целью создания новых биологически активных соединений, их практическому использованию и внедрению результатов исследований, основ планирования эксперимента, методов математической обработки данных (ПК-1);
- способностью и готовностью формулировать цели и задачи научных исследований в соответствии с современными тенденциями и перспективами развития биорганической химии и смежных наук, обоснованно выбирать теоретические и экспериментальные методы и средства решения сформулированных задач (ПК-2);
- способностью и готовностью использовать навыки самостоятельного сбора данных, изучения, комплексного анализа и аналитического обобщения научной информации и результатов научно-исследовательских работ в области биорганического синтеза, медицинской химии, идентификации органических соединений и установления их строения (ПК-3);
- способностью и готовностью формулировать научно-обоснованные выводы по результатам исследований, участвовать в научных дискуссиях, выступать с докладами и сообщениями по тематике проводимых исследований, готовить научные публикации, методические рекомендации и заявки на изобретения; составлять заявки на гранты; поддерживать высокий уровень публикационной активности (ПК-4);
- способностью разрабатывать схемы получения и модификации биологически активных веществ; использовать физико-химические методы для контролирования протекания синтеза, свойств сырья и продукции; к реализации систем менеджмента контроля качества продуктов биорганического синтеза в соответствии с требованиями российских и международных стандартов качества; применять полученные знания, умения и навыки для управления химическими процессами (ПК-5).
- владение основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования веществ и реакций (ПК-6).

Компетенции по видам деятельности:

научно-исследовательская деятельность:

- способность предлагать пути решения, выбирать методику и средства проведения научных исследований в области химии;
- способность применять методики разработки математических и физических моделей исследуемых процессов, явлений и объектов в области органической химии;
 - способность планировать и проводить эксперименты в области химии, обрабатывать и анализировать их результаты;
 - готовность к работе на современном научном оборудовании для физико-химических исследований органических и элементоорганических соединений;

– способность подготавливать публикации, научно-технические отчеты, обзоры по результатам выполненных исследований в области химии.

В результате освоения дисциплины аспирант или соискатель должен:

- знать:

- иметь представление о физические основы методов ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии;
- представлять возможности современных спектральных методов в решении химических проблем;

– уметь:

- проводить структурный анализ органических соединений по данным УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрометрии.

- владеть:

- навыками регистрации УФ и ИК органических соединений;
- способами представления спектральных данных в научной литературе

– синтезировать:

- разрабатывать методологию проведения спектрального анализа для установления структуры органических соединений;
- составлять спектральные базы данных органических соединений;

– анализировать:

- устанавливать структуру органических соединений по УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрам.
- выявлять соответствие данных УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрометрии структуре органических соединений;

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц (180 часов). Дисциплина изучается на 2-м году аспирантуры. Дисциплина состоит из 3 модулей.

4.1. Структура дисциплины

Вид учебной работы	Объем	
	В зачетных единицах	В академических часах
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	5	180
Аудиторные занятия:	1,5	54
Лекции (Лек)	1	36
Практические занятия (ПЗ)	0,5	18
Лабораторные занятия	-	-
Самостоятельная работа (СР):	3,5	126
Другие виды самостоятельной работы	2,5	90
Реферат	1	36
Вид итогового контроля: Зачет	-	-

Вид учебной работы	Объем	
	В зачетных единицах	В астрономических часах
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	5	135
Аудиторные занятия:	2	40,5
Лекции (Лек)	1	27
Практические занятия (ПЗ)	0,5	13,5
Лабораторные занятия	-	-
Самостоятельная работа (СР):	3,5	94,5
Другие виды самостоятельной работы	2,5	67,5
Реферат	1	27
Вид итогового контроля: Зачет	-	-

4.1.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование Раздела	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит	Из аудиторных			КСР		Сам. работа
				Лекц.	Лаб	Прак			
1	Модуль 1. Введение. Электронная и инфракрасная спектроскопия	62	20	14	0	4	2	42	
2	Модуль 2. Ядерный магнитный резонанс	62	18	12	0	4	2	44	
3	Модуль 3. Масс-спектрометрия.	56	16	10	0	4	2	40	
	Итого	180	54	36	0	12	6	126	Зачет

4.2. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Модуль 1. Введение. Электронная и инфракрасная спектроскопия	Спектральные методы анализа. Понятие спектральных методов анализа, их классификация. Эмиссионная и абсорбционная спектроскопия. Принципы действия и блок-схемы приборов. Энергетический диапазон электромагнитного излучения. Рентгеновская, оптическая (УФ-, видимая, ИК-), микроволновая, радиочастотная (ЭПР, ЯМР) спектроскопии,	Лекции, самостоятельная работа

		<p>характер возбужденного состояния атомов и молекул в различных энергетических диапазонах. Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Классификация полос. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда–Физера. Принцип работы УФ спектрофотометра. Типы задач и возможности УФ – спектроскопии применительно к элементоорганическим соединениям: идентификация, количественный анализ, выявление сопряжения. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.</p> <p>ИК-спектроскопия: физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, Csp³–H, Csp²–H, Csp–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CHO, COOH, COOR, CONaI, NO₂, C≡N.</p> <p>Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная ИК спектроскопия.</p>	
--	--	--	--

		<p>Принцип работы ИК спектрофотометра. ИК-спектрометры с преобразованием Фурье. Типы задач и возможности ИК - спектроскопии: отнесение полос, сопоставление спектра и строения вещества, идентификация. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область 4000 – 650 см⁻¹).</p>	
2	Модуль 2. Ядерный магнитный резонанс	<p>Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Принцип работы ЯМР спектрометра, представления о Фурье-преобразовании, регистрация спектров. Представление о химическом сдвиге. Спин-спиновое взаимодействие. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом $I=1/2$: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A₂, AX, AB и A₂B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка. Спектроскопия ¹H ЯМР: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H} – H. Двойной резонанс. Спектроскопия ¹³C ЯМР: шкала химических сдвигов ядер ¹³C, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H}, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ¹³C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Приготовление образцов для ЯМР-спектроскопии. Корреляционная спектроскопия ЯМР (одномерная и двумерная, COSY, HMQC, HSQC, HMBC, INADEQUATE. Ядерный эффект Оверхаузера (природа и применение для анализа динамических процессов). Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ¹H и ¹³C ЯМР.</p>	<p>Лекции, практические занятия, самостоятельная работа.</p>

3	Модуль 3. Масс-спектрометрия	<p>Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Классификация масс-спектрометрических приборов. Методы ионизации (электронный удар, химическая ионизация, химическая ионизация при атмосферном давлении, индуктивно-связанная плазма). Методы ионизации соединений с высокой молекулярной массой и высокомолекулярных соединений (полевая десорбция (FD), химическая ионизация (CI), электроспрей (ES), матричная лазерная десорбционная ионизация (MALDI)). Методы разделения и регистрации ионов. Интерпретация масс-спектров, полученных с использованием разных методов ионизации. Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом: простой разрыв связей (α-разрыв, бензильный и аллильный разрывы), ретро-реакция Дильса-Альдера, перегруппировка Мак-Лафферти, скелетные перегруппировки, ониевые реакции. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z. Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения. Перегруппировка Мак-Лафферти. Использование баз данных и библиотек масс-спектров для структурного анализа.</p>	Лекции, практические занятия, самостоятельная работа.
---	------------------------------	--	---

5. Образовательные технологии

Освоение программы предусматривает аудиторные занятия (лекции, семинары и практические работы), включающие интерактивные формы освоения учебного материала и самостоятельную работу, связанную с применением спектральных методов для решения проблем диссертационного исследования. Для повышения усвоения материала лекции сопровождаются визуальными материалами в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а также результатов компьютерного моделирования физико-химических процессов. Практические работы проводятся в спектральных лабораториях на современных спектрах приборах с использованием специального программного обеспечения и интернет-ресурсов с участием обучаемых в научной работе и выполнении исследовательских проектов.

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в библиотеке, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение. В ходе самостоятельной работы проводится анализ литературных данных, составление подборки статей из научных журналов по применению различных спектральных методов для идентификации биоорганических соединений.

6. Фонд оценочных средств для оценки освоения дисциплины «Спектральные методы исследования органических соединений»

Типовые задания для самостоятельной работы

Подготовка обзора литературы по применению методов масс-, ИК, УФ и ЯМР- спектроскопии для идентификации и исследования строения биоорганических соединений.

Аттестация:

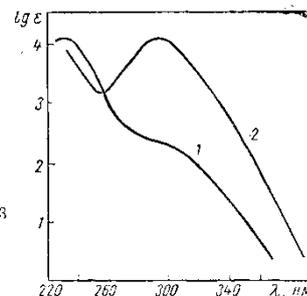
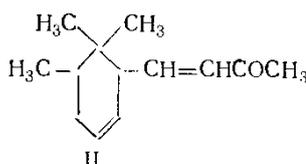
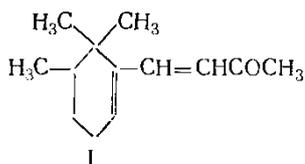
- а) Текущая аттестация - выполнение 3 контрольных работ по основным модулям дисциплины и подготовка реферата
- б) Итоговая аттестация – по результатам выполнения зачетной работы

6.1.1. Типовые варианты для контрольных работ

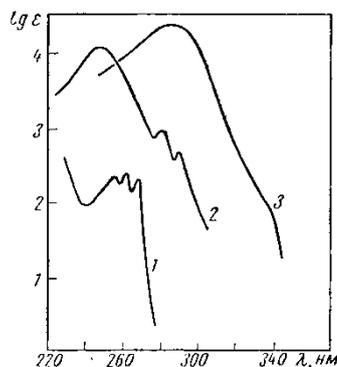
Модуль 1. Контрольная работа №1 (20 баллов)

Вариант 1

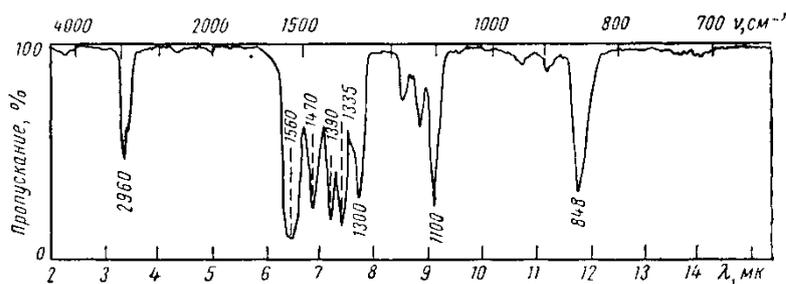
1. Какой из УФ-спектров принадлежит α -иرونу, а какой β -иرونу



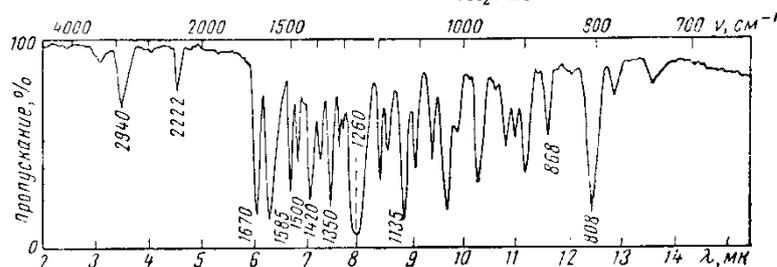
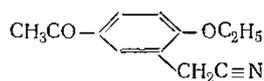
2. Отнесите УФ-спектры пропенилбензола, аллилбензола и 1-фенилпентадиена:



3. Определите по ИК-спектру какие кислород и азот содержащие группы входят в состав соединения $C_3H_7O_2N$



4. Отнесите основные полосы поглощения в ИК-спектре следующего соединения

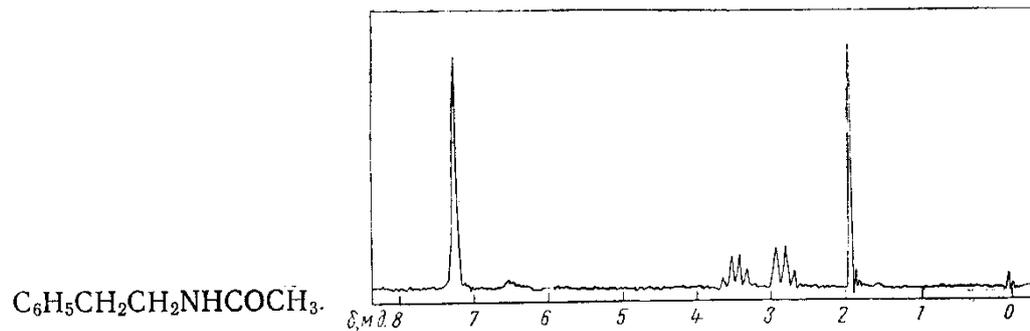


Оценка заданий:

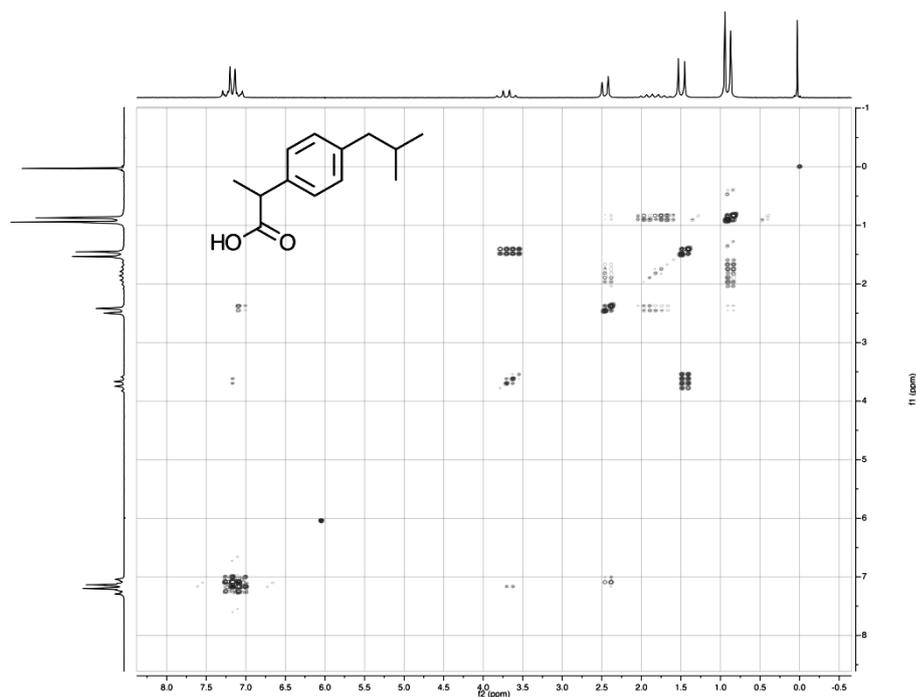
№ задания	1	2	3	4	Σ
Оценка, балл	5	5	5	5	20

Модуль 2. Контрольная работа №2 (15 баллов)

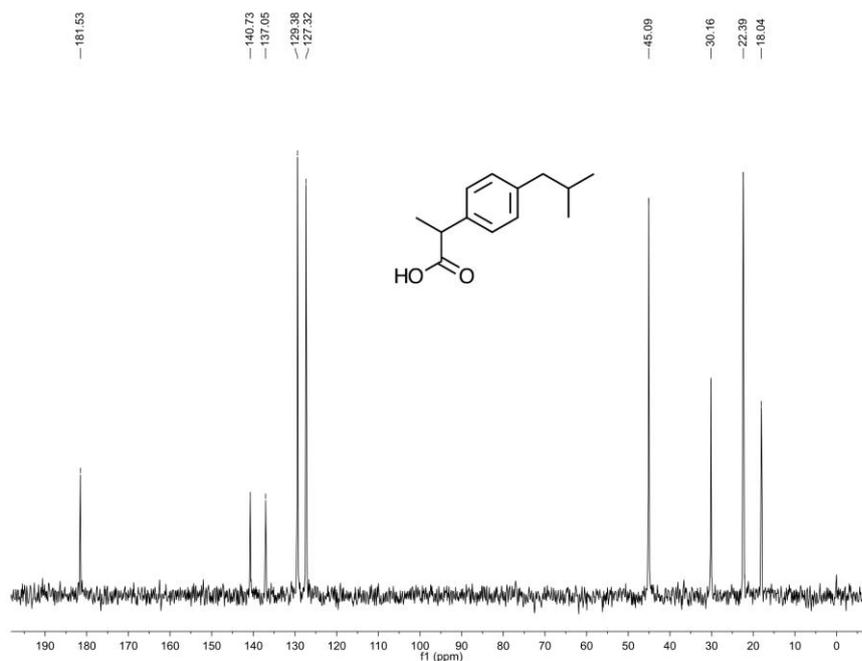
1. Сделайте описание ЯМР-спектра и сопоставьте его со структурой соединения



2. Сделайте отнесение для ЯМР-спектра следующего соединения



3. Сделайте описание ЯМР-спектра и сопоставьте его со структурой соединения

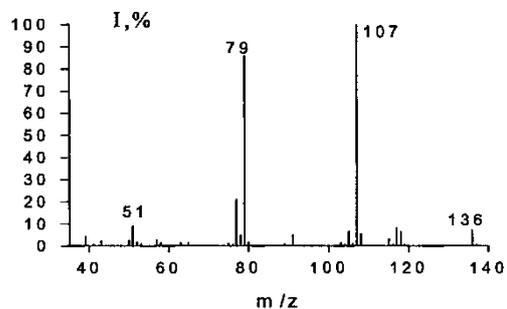


Оценка заданий:

№ задания	1	2	3	Σ
Оценка, балл	5	5	5	15

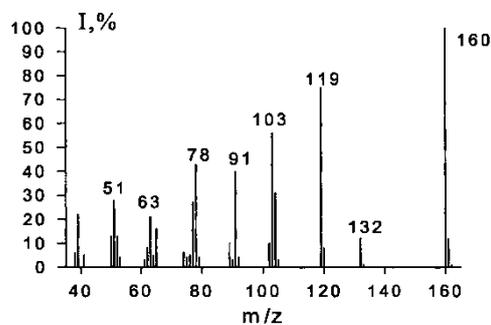
Модуль 3. Контрольная работа №3 (10 баллов)

1. Установите строение соединения по масс-спектру ЭИ



m/z	I, %	m/z	I, %
39	4,33	91	4,97
43	2,41	105	6,64
50	2,68	106	1,10
51	9,10	107	100
57	2,68	108	7,68
58	1,47	109	0,45
63	1,69	115	3,02
65	1,69	117	8,11
77	21,1	118	6,64
78	4,97	136	7,20
79	85,9	137	0,71
80	5,66	138	0,05

2. Установите строение соединения по масс-спектру ЭИ



m/z	I, %	m/z	I, %
39	22,0	79	4,17
41	5,24	89	10,1
50	13,7	90	3,23
51	28,4	91	40,4
52	13,4	92	4,17
53	4,17	102	10,1
61	3,76	103	56,6
62	8,28	104	31,7
63	21,5	105	3,72
64	5,24	119	75,1
65	16,9	120	6,61
74	6,07	132	12,4
75	4,17	133	1,24
76	5,24	160	100
77	27,0	161	10,7
78	43,8	162	0,65

Оценка заданий:

№ задания	1	2	Σ
Оценка, балл	5	5	10

6.1.2. Примерный перечень оценочных средств для оценки компетенций при аттестации аспирантов по дисциплине «Спектральные методы исследования органических соединений»

Тема реферата: «Комплексный анализ оригинальной экспериментальной работы в области биоорганической или медицинской химии»

Примерный перечень статей:

- *J. Med. Chem.*, Article ASAP DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b01343
- *J. Med. Chem.*, Article ASAP DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00857
- *J. Med. Chem.*, **2015**, 58 (20), 7938–7948
- *Letters in Drug Design & Discovery*, **2009**, 6, 51-55
- *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **2001**, 635

Примерный перечень заданий

В реферате представьте результаты анализа и решение следующих задач:

- На основе прочитанной статьи сделайте заключение об основных результатах, достигнутых в описываемых работах, выделите структуру с наибольшей биологической активностью (УК-1, ПК-1).
- Провести анализ спектральных методов исследования, применяемых в отношении исследуемого класса соединений (УК-1, ПК-1).
- Сделайте вывод о том, насколько методы исследования, представленные в предложенных статьях, соотносятся с современным уровнем методов исследования в этой области (какому уровню соответствуют) (УК-1, УК-2, ПК-2).
- Провести анализ спектральных материалов работы и соответствие структуры соединения спектральным данным, расшифруйте спектры (УК-3, УК-5).
- Предложите структуру аналога для наиболее активного соединения (ПК1-ПК5) – предскажите изменения в его спектральных характеристиках?

15-14 баллов – аспирант свободно, с глубоким знанием материала правильно и полно решил задачу (выполнил все задания, правильно ответил на все поставленные вопросы);

13-10 баллов – если аспирант достаточно убедительно, с незначительными ошибками в теоретической подготовке и достаточно освоенными умениями по существу правильно ответил на вопросы или допустил небольшие погрешности в ответе;

9-6• баллов – если аспирант недостаточно уверенно, с существенными ошибками в теоретической подготовке и плохо освоенными умениями ответил на вопросы ситуационной задачи; с затруднениями, но все же сможет при необходимости решить подобную задачу на практике;

0-5• баллов – если аспирант имеет очень слабое представление о предмете и допустил существенные ошибки в ответе на большинство вопросов ситуационной задачи, неверно отвечал на дополнительно заданные ему вопросы, не может справиться с решением подобной задачи на практике

6.2 Вопросы для зачетной работы

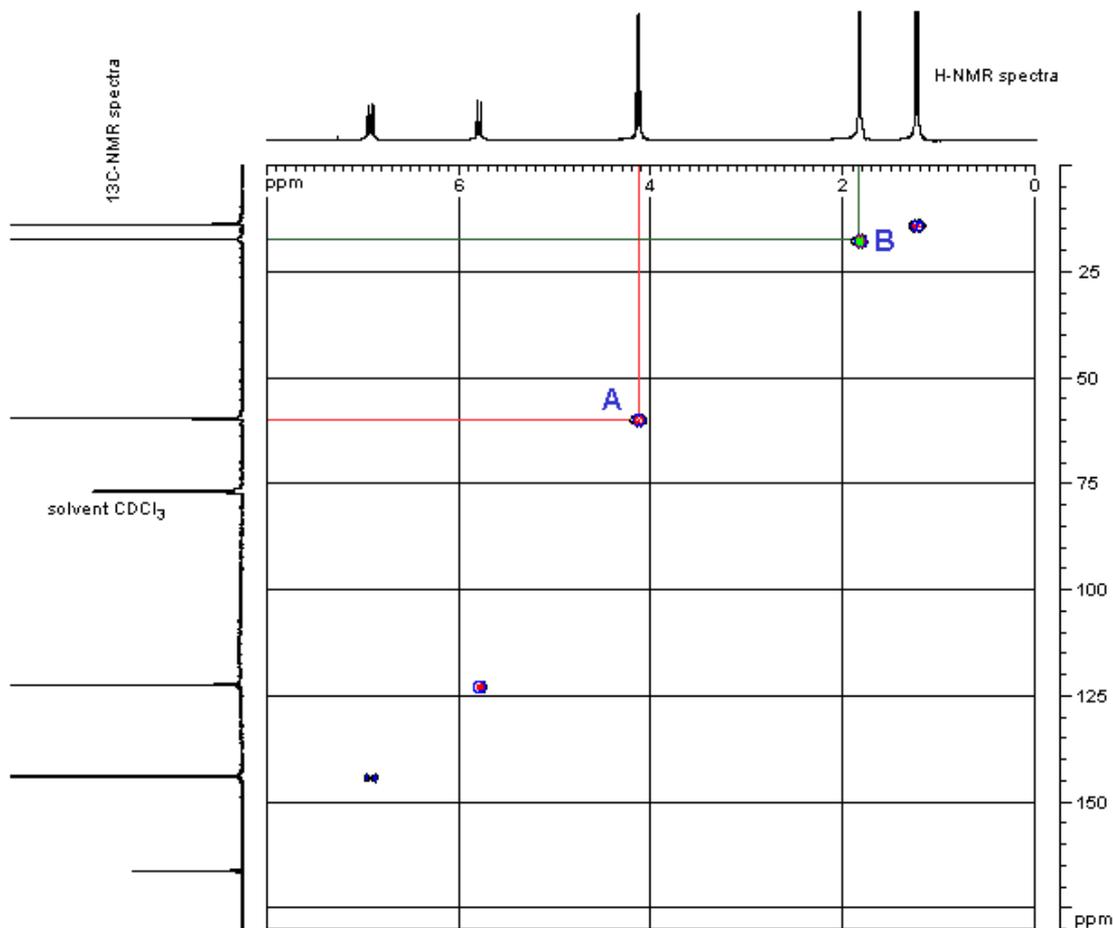
1. Физико-химические основы метода УФ-спектроскопии: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора
2. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров. Классификация полос поглощения в электронных спектрах
3. Цветность соединений, правила Вудворда–Физера, Степанова. Влияние растворителей в УФ-спектроскопии: батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты.
4. Физические основы метода ИК-спектроскопии: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул.
5. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности.
6. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений.
7. Физические основы метода ЯМР-спектроскопии: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер.
8. Спектроскопия ^1H ЯМР: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия $J_{\text{H-H}}$.
9. Спектроскопия ^{13}C ЯМР: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия $J_{\text{C-H}}$, полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов.
10. Физические основы метода масс-спектроскопии: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов.
11. Методы ионизации в масс-спектрометрии. Методы разделения и регистрации ионов.
12. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом. Масс-спектрометрические правила: азотное, “четно-электронное”, затрудненный разрыв связей

6.3. ЗАДАНИЯ ДЛЯ ИТОГОВОГО КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (ЗАЧЕТ)

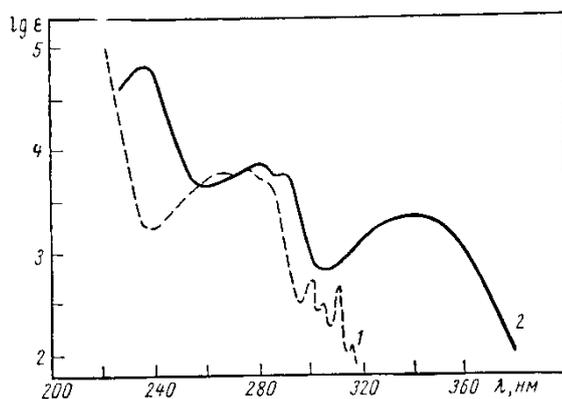
Пример зачетной работы (максимальная оценка – 40 баллов)

Вариант 1

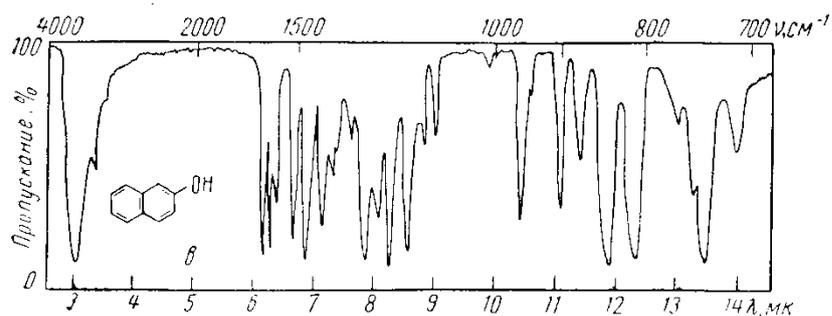
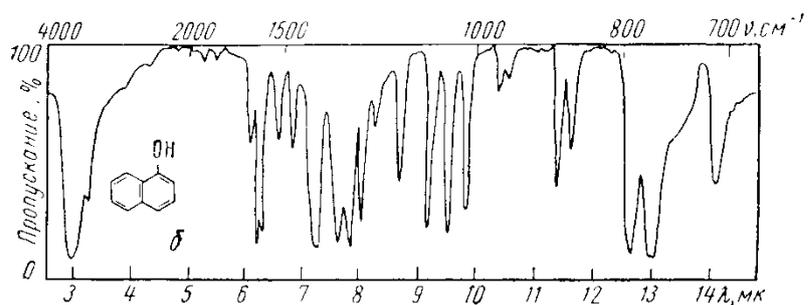
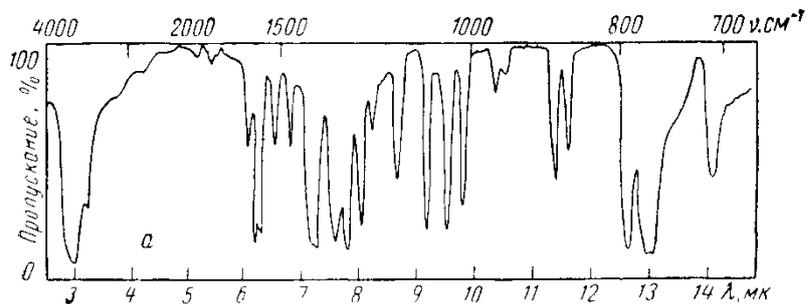
1. Спектроскопия ^1H ЯМР: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия $J_{\text{H-H}}$.
2. Определите структуру соединения на основании HETCOR ЯМР-спектра



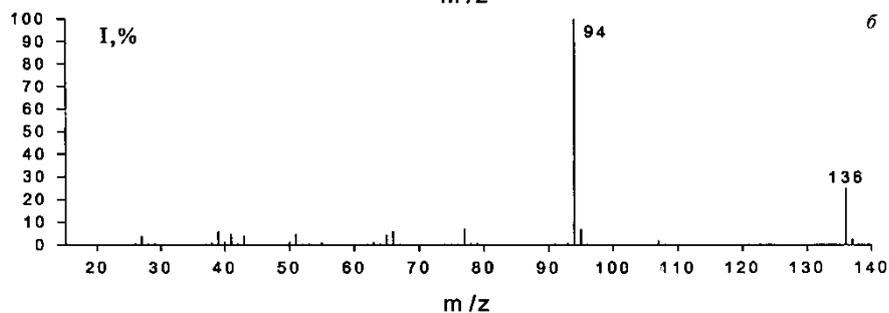
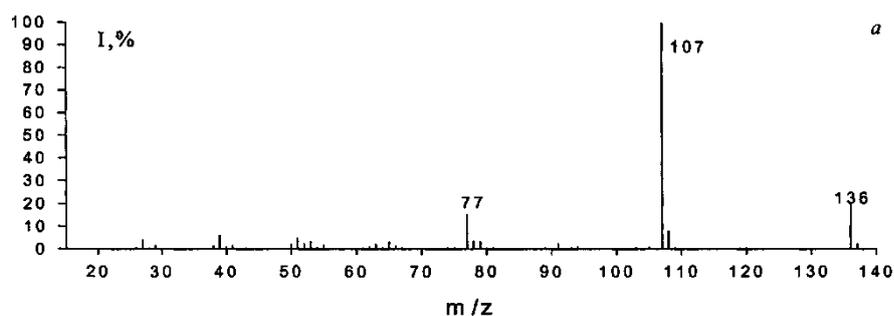
3. Отнесите и объясните различие УФ-спектров 1-нафтиламина в спирте при pH 7 и pH 1



4. Определите какому из изомерных нафтолов относится ИК-спектр представленного образца (а).



5. Отнесите масс-спектры ЭИ 4-пропилфенола и фенилпропилового эфира. Ответ обоснуйте



Оценка заданий:

№ задания	1	2	3	4	5	Σ
Оценка, балл	8	8	8	8	8	20

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендуемая литература

а) основная литература

1. Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д., Спектрометрическая идентификация органических соединений, М.,Бином. Лаборатория знаний 2011.
2. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков, М: МБФНП, 2011.

б) дополнительная литература

1. А. Т. Лебедев. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: БИНОМ. Лабораторий знаний, 2003.
2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии: Учебник. М.: Мир, 2003.
3. А. Барнс, В. Дж. Орвил-Томас, Колебательная спектроскопия. Современные воззрения и тенденции, М., 1981
4. К Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Бокаун, ЯМР в одном и двух измерениях, М., Мир 1990.
5. Д. Браун, А. Флloyd, М.Сейнзбери, Спектроскопия органических веществ, М., Мир 1992.
6. Смит А., Прикладная инфракрасная спектроскопия, пер. с англ., М., 1982;

7. . Зигбан, К. Нордлинг, А. Фальманидр. Электронная спектроскопия, М., Мир, 1971
8. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических молекул. М.: Высшая школа, 1984.
9. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
10. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984.
11. Breitmaier E. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. John Wiley & Sons, LTD, 2002.
12. Сильверстейн Р., Басслер Г., Моррил Т. Спектроскопическая идентификация органических соединений. М.: Мир, 1977.
13. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа, 1971.
14. Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы: Учебник для вузов - М.: Высшая школа, 1989– 287 с.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

ФГБНУ НИИНА располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки аспирантов, предусмотренных учебным планом обучения по профилю «Биоорганическая химия»: Аудитория для проведения лекций, оснащенная компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами. Лаборатории оснащены современным оборудованием для выполнения всех основных методов спектрального анализа. Инструментальная база ФГБНУ НИИНА включает ЯМР спектрометр Varian-400, жидкостной хромато-масс спектрометр Micro TOF-Q II, ИК-Фурье спектрометр Nicolet 380 с оптическим блоком iS10, спектрометр UNICO UV/Vis 2804, высокоэффективные жидкостные хроматографы LC-20 (Shimadzu), автоматическую флеш-хроматографическую систему Isolera Prime (Biotage).

В процессе обучения применяются следующие образовательные технологии:

1. Сопровождение лекций показом визуального материала.
2. Сопровождение занятий демонстрациями слайдов, моделей строения органических соединений ИК-, УФ-, ЯМР- и масс-спектров.
3. Активные методы обучения работе на ИК-, УФ-, ЯМР- и масс-спектрометрах.

9. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

№ п/п	Наименование и краткая характеристика электронных образовательных и информационных ресурсов (электронных изданий и информационных баз данных)	Количество экземпляров, точек доступа
1	Электронная библиотека Первого МГМУЗ	Не ограничен
2	QPAT - патентная база компании Questel http://www.qpat.com/index.htm	Не ограничен
3	Университетская информационная система Россия (УИС РОССИЯ) Http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp	Не ограничен
4	AAAS: Журнал «Science» http://www.sciencemag.org/magazine	Не ограничен
5	Scopus (https://www.scopus.com/) - реферативная база данных, которая индексирует более 21,000 наименований научно-технических и медицинских журналов примерно 5,000 международных издательств	Не ограничен
6	Научная электронная библиотека: Российские академические журналы (elibrary.RU) http://elibrary.ru/defaultx.asp	Не ограничен
7	Электронная библиотека диссертаций (ЭБД) РГБ http://diss.rsl.ru/	Не ограничен
8	ScienceDirect (https://www.sciencedirect.com) – ведущая информационная, полнотекстовая платформа Elsevier для ученых, преподавателей, студентов, специалистов медицинской области	Не ограничен
9	Medline Complete http://search.ebscohost.com/	Не ограничен
10	База данных Nano https://goo.gl/PdhJdo Этот уникальный ресурс предоставляет данные о более 200 000 наноматериалов и наноустройств, собранные из самых авторитетных научных изданий	Не ограничен
11	Платформа Nature https://www.nature.com/siteindex/index.html Более 90 естественнонаучных журналов, включая старейший и один из самых авторитетных научных журналов - Nature	Не ограничен