

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Павлов Валентин Николаевич  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 20.01.2022 16:41:57  
Уникальный программный ключ:  
a562210a8a161d1bc9a34c4a0a3e820ac76b9d73665849e6d6db2e5a4e71d6ee

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ МЕДИЦИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
МИНИСТЕРСТВА ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Кафедра общей химии

УТВЕРЖДАЮ

Ректор

Павлов В.Н.



06

2021 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ**  
**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ**  
**ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

**Направление подготовки (код, специальность) 33.05.01 ФАРМАЦИЯ**

**Форма обучения очная**

**Срок освоения ООП 5 лет**

Курс II

Контактная работа – 72 часа

Лекции – 21 час

Практические занятия – 51 час

Самостоятельная работа – 36 часов

Семестр IV

Зачет (IV семестр)

Всего 108 часов

(3 зачетные единицы)

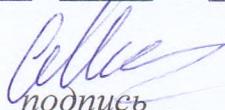
Уфа  
2021

При разработке рабочей программы дисциплины по выбору в основу положены:

- 1) 1) ФГОС ВО – специалитет по специальности 33.05.01 Фармация, утвержденный приказом Министерства образования и науки РФ № 219 от «27» марта 2018 г.
- 2) Учебный план по специальности 33.05.01 Фармация, утвержденный Ученым советом ФГБОУ ВО «Башкирский государственный медицинский университет» от «25» мая 2021 г. Протокол № 6
- 3) Приказ Минтруда России №91н от «9» марта 2016 г. «Об утверждении профессионального стандарта «Провизор»

Рабочая программа учебной дисциплины одобрена на заседании кафедры общей химии от «31» 05 2021г. Протокол № 7

Заведующий кафедрой

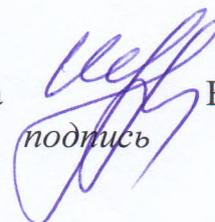
  
подпись

(Мещерякова С.А.)

Рабочая программа дисциплины по выбору одобрена Ученым советом фармацевтического факультета от «23» 06 2021 г. Протокол № 11

Председатель

Ученого совета фармацевтического факультета

  
подпись

Кудашкина Н.В.

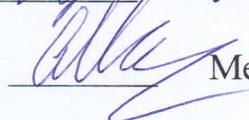
**Разработчики:**

Доцент



Шумадалова А.В.

Заведующий кафедрой



Мещерякова С.А.

**Рецензенты**

Заведующий кафедрой аналитической химии Башкирского государственного университета, профессор, член-корр. АН РБ Майстренко В.Н.

Профессор кафедры общей и аналитической химии Уфимского государственного нефтяного технического университета, д. х. н. Рольник Л.З.

## СОДЕРЖАНИЕ

1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА .....	4
2. ВВОДНАЯ ЧАСТЬ.....	6
3. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ .....	11
3.1. Объем дисциплины по выбору и виды учебной работы.....	11
3.2. Разделы дисциплины по выбору и компетенции, которые должны быть освоены при их изучении.....	11
3.3. Разделы дисциплины по выбору, виды учебной деятельности и формы контроля .....	14
3.4. Название тем лекций и количество часов по семестрам изучения дисциплины по выбору.....	16
3.5. Название тем практических занятий и количество часов по семестрам изучения дисциплины по выбору .....	17
3.6. Лабораторный практикум. ....	17
3.7. Самостоятельная работа обучающегося.....	17
3.8. Оценочные средства для контроля успеваемости и результатов освоения дисциплины по выбору .....	18
3.9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины по выбору.....	24
3.10. Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины. ....	25
3.11. Образовательные технологии .....	25
3.12. Разделы дисциплины по выбору и междисциплинарные связи с последующими дисциплинами .....	25
4. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ: .....	26

## 1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Дисциплина по выбору «*Теоретические основы методов исследования строения химических соединений*» относится к дисциплинам по выбору специальности 33.05.01 Фармация и основывается на изучении предметов: физики, математики, общей и неорганической химии.

Целью освоения дисциплины по выбору является углубленное изучение теоретических основ, практических возможностей, важнейших для провизоров физических методов исследования, изучение современной аппаратуры и условий проведения эксперимента, умение интерпретировать и грамотно оценивать экспериментальные данные. Обучающийся должен научиться оптимальному выбору методов для решения поставленных задач и делать заключения на основании анализа и сопоставления всех имеющихся данных.

Обучающийся должен сформировать компетенции:

УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий

(УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними);

ОПК-1 Способен использовать основные биологические, физико-химические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов

(ОПК-1.2 Применяет основные физико-химические и химические методы анализа для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, лекарственного растительного сырья и биологических объектов;

ОПК-1.3 Применяет основные методы физико-химического анализа в изготовлении лекарственных препаратов);

ПК-4 Способен участвовать в мониторинге качества, эффективности и безопасности лекарственных средств и лекарственного растительного сырья

(ПК-4.1 Проводит фармацевтический анализ фармацевтических субстанций, вспомогательных веществ и лекарственных препаратов для медицинского применения заводского производства в соответствии со стандартами качества)

и трудовые функции:

А/03.7 Обеспечение хранения лекарственных средств и других товаров аптечного ассортимента,

А/05.7 Изготовление лекарственных препаратов в условиях аптечных организаций

Особое значение данной дисциплины по выбору в системе подготовки обучающихся состоит в том, что он может служить теоретической базой научных исследований обучающихся, выполняющих научно-исследовательские работы в области фармацевтической химии и фармакогнозии. Благодаря этому обеспечивается единство учебного и научного процессов.

В современной химии установление строения химических соединений немислимо без применения комплекса спектральных методов, основными среди которых являются электронная и колебательная спектроскопия, спектроскопия ядерного магнитного резонанса, масс-спектрометрия и рентгеноструктурный анализ. Дисциплина по выбору посвящена изучению спектральных методов исследования строения химических соединений и состоит из цикла лекций, в которых рассматриваются теоретические основы методов и общая методология их использования; практических занятий, обеспечивающих навыки практической работы и интерпретации результатов. Во время которых обсуждаются возникающие при изучении затруднения, выполняются тестовые задания, решаются типовые задачи и интерпретируются спектры. После изучения курса обучающиеся должны овладеть теоретическими знаниями и практическими навыками использования спектральных методов исследования строения химических веществ различных классов. Методология дисциплины предполагает тесную связь с другими дисциплинами: неорганической, органической, аналитической, физической химией, физикой, квантовой механикой, математикой. Обучение дисциплины по выбору завершается сдачей зачета.

## 2. ВВОДНАЯ ЧАСТЬ

### 2.1. Цель и задачи освоения дисциплины по выбору.

**Цель** освоения дисциплины по выбору:

- ознакомить с основами теории и аппаратного оформления методов исследования строения химических соединений;
- изложить принципы получения спектральной информации и способы ее интерпретации;
- научить применению спектральных методов для выяснения и доказательства строения молекул органических и элементоорганических соединений;
- дать навыки совместного (комплексного) использования методов спектроскопии;
- развить у будущего специалиста-провизора химического мышления, что является необходимым условием для изучения медико-биологических, естественнонаучных, профессиональных и специальных дисциплин, а так же формирование умений и навыков химического эксперимента.

При этом **задачами** дисциплины по выбору являются:

- 1) сформировать базовые знания и умения в области методов исследования строения химических соединений для подготовки к научно-исследовательской работе;
- 2) раскрыть роль физико-химических методов исследования в работе провизора-аналитика;
- 3) рассмотреть основные экспериментальные закономерности физико-химических методов исследования и установления структуры химических соединений;
- 4) обеспечить овладение методологией применения физико-химических методов исследований химических соединений;
- 5) формирование навыков изучения научной литературы и официальных статистических обзоров;
- б) формирование у обучающегося навыков общения с коллективом.

### 2.2. Место дисциплины по выбору в структуре ООП специальности

2.2.1. Дисциплина по выбору «*Теоретические основы методов исследования строения химических соединений*» относится к дисциплинам по выбору специальности 33.05.01 Фармация.

2.2.2 Для изучения данной дисциплины по выбору обучающийся должен по  
- физике

**Знать:**

- основные законы современной физики; физические закономерности
- теоретические основы физических методов анализа вещества;
- метрологические требования при работе с физической аппаратурой;
- правила техники безопасности работы в химической лаборатории и с

физической аппаратурой.

**Уметь:**

- определять физические свойства лекарственных веществ;
- выбирать оптимальный метод качественного и количественного анализа вещества, используя соответствующие физические приборы и аппараты.

**Владеть:**

- методиками измерения значений физических величин;
- навыками практического использования приборов и аппаратуры при физическом анализе веществ;
- методикой оценки погрешности измерений.

**Сформировать компетенции:** УК-8; ОПК-1; ПК-4

*-математике*

**Знать:**

- основные правила дифференцирования и интегрирования.
- основы теории вероятности и математической статистики.

**Уметь:**

- дифференцировать и интегрировать с помощью формул и простейших приемов;
- вычислять основные характеристики и оценки распределения дискретной случайной величины;
- вычислять абсолютные и относительные погрешности результатов измерений;
- табулировать экспериментальные данные, графически представлять их, интерполировать, экстраполировать для нахождения искомых величин;
- проводить элементарную статистическую обработку экспериментальных данных в химических и биологических опытах.

**Владеть:**

- методами нахождения производных и интегралов функций;
- методикой вычисления характеристик, оценок характеристик распределения и погрешности измерений;
- методами статистической обработки экспериментальных результатов химических и биологических исследований с помощью компьютера.

**Сформировать компетенции:** УК-8; ОПК-1; ПК-4

*-химии общей и неорганической.*

**Знать:**

- правила техники безопасности работы в химической лаборатории;
- современную модель атома, периодический закон, периодическую систему Д. И. Менделеева;
- химическую связь; номенклатуру неорганических соединений; строение комплексных соединений и их свойства;
- классификацию химических элементов по семействам;
- зависимость фармакологической активности и токсичности от положения элемента в периодической системе;
- химические свойства элементов и их соединений;
- основные начала термодинамики, термохимия;

-значения термодинамических потенциалов (энергий Гиббса и Гельмгольца);  
-следствия из закона Гесса; химическое равновесие, способы расчета констант равновесия;

основные положения теории ионных равновесий применительно к реакциям кислотно-основного, окислительно-восстановительного, осадительного и комплексонометрического характера.

#### **Уметь:**

-рассчитывать термодинамические функции состояния системы, тепловые эффекты химических процессов;

-составлять электронные конфигурации атомов, ионов;

-электронно-графические формулы атомов и молекул, определять тип химической связи; прогнозировать реакционную способность химических соединений и физические свойства в зависимости от положения в периодической системе;

-теоретически обосновывать химические основы фармакологического эффекта и токсичности;

-применять правила различных номенклатур к различным классам неорганических соединений;

-готовить истинные растворы; собирать простейшие установки для проведения лабораторных исследований;

-пользоваться химическим оборудованием; табулировать экспериментальные данные;

-проводить лабораторные опыты, объяснять суть конкретных реакций, оформлять отчетную документацию по экспериментальным данным.

#### **Владеть:**

-навыками интерпретации рассчитанных значений термодинамических функций с целью прогнозирования возможности осуществления и направление протекания химических процессов;

-техникой химических экспериментов, проведения пробирочных реакций, навыками работы с химической посудой;

-правилами номенклатуры неорганических веществ.

**Сформировать компетенции:** УК-8; ОПК-1; ПК-4

### **2.3. Требования к результатам освоения дисциплины по выбору:**

**2.3.1. В рамках освоения программы специалитета выпускники должны готовиться к решению задач профессиональной деятельности следующих типов:**

1. Фармацевтическая;
2. Организационно-управленческая;
3. Научно – исследовательская.

**2.3.2. Изучение дисциплины по выбору направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций:**

п/ №	Номер/ индекс компетенции с содержанием компетенции (или ее части)/трудовой функции	Номер индикатора компетенции с его содержанием (или ее части)	Индекс трудовой функции и ее содержание	Перечень практических навыков по овладению компетенцией	Оценочные средства
1.	<b>УК-1.</b> Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	<b>УК-1.1.</b> Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними	-	применение спектральных методов для выяснения и доказательства строения молекул органических соединений.	собеседование, интерпретация спектров, решение задач, тестирование, реферативные работы.
2.	<b>ОПК-1.</b> Способен использовать основные биологические, физико-химические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	<b>ОПК-1.2.</b> Применяет основные физико-химические и химические методы анализа для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, лекарственного растительного сырья и биологических объектов; <b>ОПК-1.3.</b> Применяет основные методы физико-химического анализа в	-	Применение спектральных методов для выяснения и доказательства строения молекул органических соединений.	Собеседование, интерпретация спектров, решение задач, тестирование, реферативные работы.

		изготовлении лекарственных препаратов			
3.	<b>ПК-4.</b> Способен участвовать в мониторинге качества, эффективности и безопасности лекарственных средств и лекарственного растительного сырья	<b>ПК-4.1.</b> Проводит фармацевтический анализ фармацевтических субстанций, вспомогательных веществ и лекарственных препаратов для медицинского применения заводского производства в соответствии со стандартами качества	<b>ТФ А/03.7</b> Обеспечение хранения лекарственных средств и других товаров аптечного ассортимента; <b>ТФ А/05.7</b> Изготовление лекарственных препаратов в условиях аптечных организаций	Идентификация лекарственных веществ с использованием ИК-спектров; идентификация лекарственных веществ с использованием УФ-спектров; идентификация лекарственных веществ с использованием ЯМР $^1\text{H}$ -; $^{13}\text{C}$ -; $^{15}\text{N}$ -спектров; идентификация лекарственных веществ с использованием рентгеноструктурного анализа; идентификация лекарственных веществ с использованием рамановской спектроскопии.	Собеседование, интерпретация спектров, решение задач, тестирование, реферативные работы.

### 3. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

#### 3.1. Объем дисциплины по выбору и виды учебной работы

Всего учебной работы		Всего часов/зачетных единиц	Семестр №4
<b>Контактная работа (всего), в том числе:</b>		72/2	72/2
Лекции (Л)		21/0,58	21
Практические занятия (ПЗ)		<b>51/1,42</b>	<b>51</b>
<b>Самостоятельная работа обучающегося (СРО), в том числе:</b>		36/1	36
Подготовка к занятиям (ПЗ)		20/0,56	20
Подготовка к текущему контролю (ПТК)		13/0,36	13
Рефераты		3/0,08	3
<b>Вид промежуточной аттестации</b>	Зачет	<b>108/3</b>	<b>108</b>
<b>ИТОГО: Общая трудоемкость</b>	Час.	108	108
	Зач. единицы:	3	3

#### 3.2. Разделы дисциплины по выбору и компетенции, которые должны быть освоены при их изучении

п/№	№ компетенции	Название раздела дисциплины по выбору	Содержание раздела в дидактических единицах (темы разделов и подразделов)
1	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Спектроскопические методы исследования.	Спектроскопические методы, классификация. Особенности спектральных методов и их положение на шкале электромагнитного спектра. Характер состояний и диапазон частот. Излучение и вещество.
2	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Спектроскопия в ИК-области	<b>ИК-спектроскопия.</b> Типы частот поглощения. Условия характеристичности частот. Типы колебаний и интенсивность полос поглощения. Зависимость частоты колебания от массы атомов и кратности связи. Основные области

			ИК спектра. Особенности инфракрасных спектров важнейших классов органических соединений. Характеристические частоты основных функциональных групп: OH, NO <sub>2</sub> , CN, Hal и др. Поглощение соединений с C=O группой, поглощение амидов и аминов. Факторы, влияющие на ИК спектр: водородная связь, стерические эффекты, эффект масс, изотопный эффект, сопряжение.
3	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Спектроскопия в УФ-области	<b>УФ-спектроскопия.</b> Вид и положение полос поглощения, типы электронных переходов, природа поглощения света. Законы поглощения света веществом, ограничения. Образцы. Влияние растворителя и температуры на вид полос поглощения. Способы изображения спектров, терминология. Хромофоры и ауксохромы. Поглощение насыщенных соединений и изолированных хромофоров. Поглощение ненасыщенных соединений и сопряженных хромофоров. Поглощение ароматических соединений, влияние заместителей, конденсированных ядер. Поглощение гетероароматических соединений. Исследование органических соединений с помощью УФ-спектроскопии: изучение структуры, взаимодействие хромофоров, стерические эффекты, водородная связь.
4	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Рамановская спектрометрия	История. Устройство раман-спектрометра, источники возбуждающего света. Система освещения образца. Светофильтры. Детекторы
5	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Флуориметрия	Люминесценция, виды, механизмы возникновения. Флуориметрия, источники возбуждения, детекторы. Спектр испускания и возбуждения.
6	УК-1	Резонансные методы.	<b>Спектроскопия ЯМР.</b> Сущность

	ОПК-1 ПК-4		<p>метода ЯМР, возможности, особенности, ограничения. Спин ядра, ориентация ядерного спина в магнитном поле. Условие резонанса и его экспериментальное обнаружение. Константа экранирования, абсолютный и относительный химический сдвиги. Эталоны, развертка по полю и по частоте. Зависимость химического сдвига от <math>H_0</math>. Влияние на химический сдвиг гибридизации атома углерода и электронных эффектов заместителей, температуры, концентрации, кислотности среды, растворителя. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов ЯМР. КССВ: прямые, геминальные, вицинальные и дальние константы, их знак и свойства. Спиновые системы, спектры первого и высших порядков. Ядерный эффект Оверхаузера. Способы упрощения спектров, двойной резонанс, подавление спин-спинового взаимодействия. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР.</p> <p><b>Метод ЭПР.</b> Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. g-Фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности. Константа СТС. Тонкое расщепление. Ширина линий. Приложение метода ЭПР в химии.</p>
7	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Масс-спектрометрия.	<p><b>Масс-спектрометрия.</b> Особенности регистрации масс-спектров. Образование молекулярного иона и его фрагментация. Основные закономерности фрагментации органических молекул при</p>

			электронном ударе и химической ионизации. Молекулярные, изотопные и метастабильные пики. Общий вид масс-спектра. Анализ области молекулярного иона. Масс-спектры высокого разрешения.
8	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Рентгеноструктурный анализ	<p>Основные свойства рентгеновских лучей и их практическое использование для изучения вещества. Сплошной спектр рентгеновских лучей. Закономерности сплошного спектра. Линейчатый спектр рентгеновских лучей. Закономерности линейчатого спектра и их объяснение. Области применения характеристических лучей.</p> <p>Поглощение рентгеновского излучения веществом: основной закон ослабления лучей, коэффициента ослабления, зависимость от длины волны. Практические приложения закона.</p> <p>Методы рентгеноструктурного анализа:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Метод Дебая - Шеррера - Хелла (метод порошка)</li> <li>2. Метод Лауэ</li> <li>3. Метод вращения кристаллов.</li> </ol>
9	УК-1 ОПК-1 ПК-4	Расчетно-теоретические методы квантовой химии.	Сущность расчетных методов квантовой химии. Современные полуэмпирические методы и их особенности, возможности. Расчет молекулярных характеристик: энергии, геометрии молекул, энергии и формы МО, дипольных моментов.

### 3.3. Разделы дисциплины по выбору, виды учебной деятельности и формы контроля

№№ п/п	№ семестра	Название раздела дисциплины	Виды учебной деятельности, включая самостоятельную работу обучающегося в часах	Формы текущего контроля
--------	------------	-----------------------------	--	-------------------------

		ны по выбору	Л	ЛР	ПЗ	СРО	Всего часов	успеваемости (по неделям семестра)
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	IV	Спектроскопические методы исследования.	2		4	2	8	Тестирование, решение задач
2		Спектроскопия в ИК-области.	2		4	4	10	Тестирование, решение задач
3		Спектроскопия в УФ-области.	2		4	4	10	Тестирование, решение задач
4		Рамановская спектроскопия	1		4	4	9	Тестирование, решение задач
5		Флуориметрия	2		4	4	10	Тестирование, решение задач
6		Резонансные методы.	6		16	4	26	Тестирование, решение задач
7		Масс-спектрометрия.	2		4	4	10	Тестирование, решение задач, написание реферата
8		Рентгеноструктурный анализ	2		4	4	10	Тестирование, решение задач
9		Расчетно-теоретические методы квантовой химии.	2		4	4	10	Решение задач
	IV	Зачет			3	2	5	Собеседование
		<b>ИТОГО:</b>	21		51	36	108	

### 3.4. Название тем лекций и количество часов по семестрам изучения дисциплины по выбору

№ п/п	Название тем лекций раздела дисциплины по выбору	Семестры
		№ 4
1	2	3
1.	Теоретические основы спектроскопических методов исследования.	2
2.	ИК-спектроскопия	2
3.	УФ- и видимая спектроскопия.	2
4.	Рамановская спектрометрия	1
5.	Флуориметрия	2
6.	Резонансные методы. ЯМР- и ЭПР-метод	2
7.	Спектроскопия ЯМР	2
8.	Корреляционная спектроскопия ЯМР	2
9.	Масс-спектрометрия.	2
10.	Рентгеноструктурный анализ.	2
11.	Расчетно-теоретические методы квантовой химии.	2
	ИТОГО	21

### 3.5. Название тем практических занятий и количество часов по семестрам изучения дисциплины по выбору

п/ №	Название тем практических занятий раздела дисциплины по выбору	Объем по семестрам
		№ 4
1	2	3
1.	Теоретические основы спектроскопических методов исследования.	4
2.	ИК-спектроскопия	4
3.	УФ- и видимая спектроскопия.	4
4.	Рамановская спектрометрия	4
5.	Флуориметрия	4
6.	ЯМР и ЭПР спектроскопия	4
7.	ЯМР $^1\text{H}$ -спектроскопия.	4
8.	ЯМР $^{13}\text{C}$ - и $^{15}\text{N}$ -спектроскопия.	4
9.	Корреляционная спектроскопия ЯМР	4
10.	Масс-спектрометрия.	4
11.	Рентгеноструктурный анализ.	4
12.	Расчетно-теоретические методы квантовой химии.	4
13.	Зачетное занятие.	3
	Итого	<b>51</b>

3.6. Лабораторный практикум - не предусмотрен.

### 3.7. Самостоятельная работа обучающегося

#### 3.7.1. Виды СРО

п/ №	№ семестра	Наименование раздела дисциплины по выбору	Виды СРО	Всего часов
1	IV	Спектроскопические методы исследования.	Подготовка к занятию	2
2	IV	Спектроскопия в ИК-области	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	4
3	IV	Спектроскопия в УФ- и видимой области.	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	4

4	IV	Рамановская спектроскопия	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	3
5	IV	Флуориметрия	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	3
6	IV	Резонансные методы	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	7
7	IV	Масс-спектрометрия.	Подготовка к занятию, написание реферата	4
8	IV	Рентгеноструктурный анализ	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	3
9	IV	Расчетно-теоретические методы квантовой химии.	Подготовка к занятию, решение ситуационных задач	4
10	IV	Зачет	Подготовка к тестированию, подготовка к промежуточной аттестации.	2
Итого часов в семестре:				36

### 3.7.2. Примерная тематика рефератов:

1. Резонансные методы исследования вещества.
2. Применение ИК-спектроскопии в фармации.
3. Применение УФ-спектроскопии в фармации.
4. Применение ЯМР-спектроскопии в фармации
5. Двумерная спектроскопия
6. Интерпретация двумерных спектров ЯМР: распознавание образов и моделирование.

### 3.8. Оценочные средства для контроля успеваемости и результатов освоения дисциплины по выбору

#### 3.8.1. Виды контроля и аттестации, формы оценочных средств

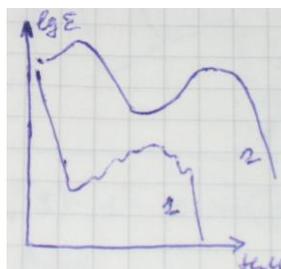
п/№	№ семестра	Виды контроля	Наименование раздела дисциплины по выбору	Оценочные средства		
				Форма	Количество вопросов в задании	Количество независимых вариантов

1	IV	ВК, ТК	Спектроскопические методы исследования.	Тесты, задачи, спектры	5	5
2	IV	ВК, ТК	Спектроскопия в ИК-области	Тесты, задачи, спектры.	5	5
3	IV	ВК, ТК	Спектроскопия в УФ- и видимой области.	Тесты, задачи, спектры	5	5
4	IV	ВК, ТК	Рамановская спектрометрия	Тесты, задачи, спектры.	5	5
5	IV	ВК, ПК	Флуориметрия	Тесты, задачи, спектры	5	5
6	IV	ВК, ТК	Резонансные методы.	Тесты, задачи, спектры	5	5
7	IV	ВК, ТК	Масс-спектрометрия	Тесты, задачи, спектры	5	5
8	IV	ВК, ТК	Рентгеноструктурный анализ	Тесты, задачи, спектры	5	5
9	IV	ВК, ТК	Расчетно-теоретические методы квантовой химии.	Задачи.	5	5
10	IV		Зачет	Тесты, задачи, спектры	5	5

### 3.8.2. Примеры оценочных средств для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины по выбору.

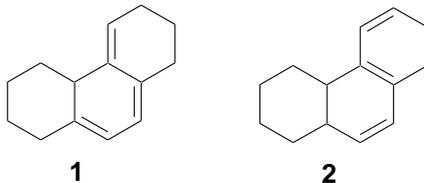
*Типовые задачи по УФ-спектроскопии:*

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



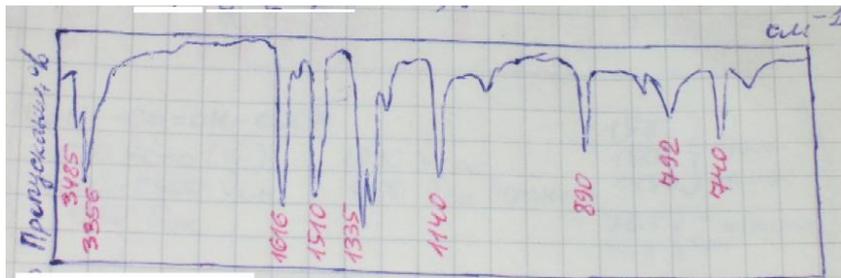
2) Почему у  $\beta$ -нафталя в сравнении с  $\beta$ -нафтилкарбинолом наблюдается батохромное смещение  $\alpha$ -полосы?

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

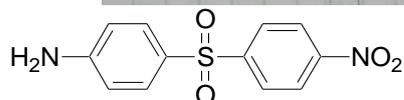
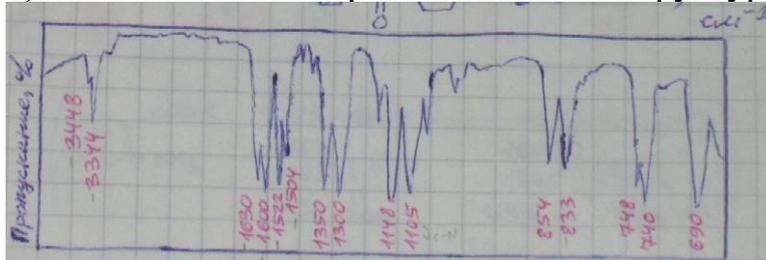


*Типовые задачи по ИК-спектроскопии:*

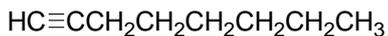
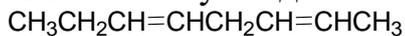
1) Записан спектр поглощения вещества с брутто-формулой  $C_6H_4Cl_2N_2O_2$  в KBr. Определить, в какую функциональную группу входят атомы O и N?



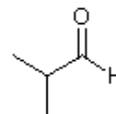
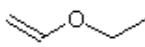
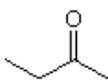
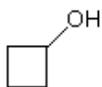
2) Сопоставить спектр поглощения со структурой (запись в KBr):

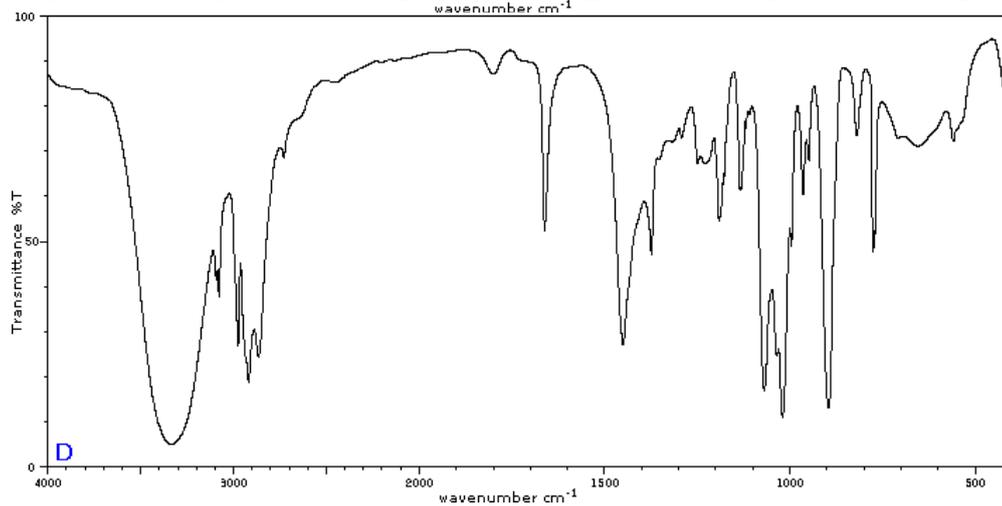
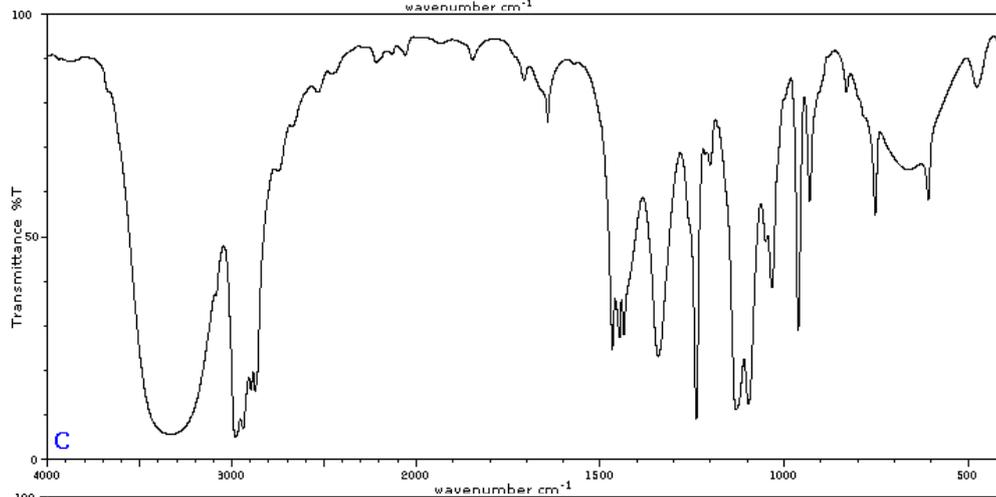
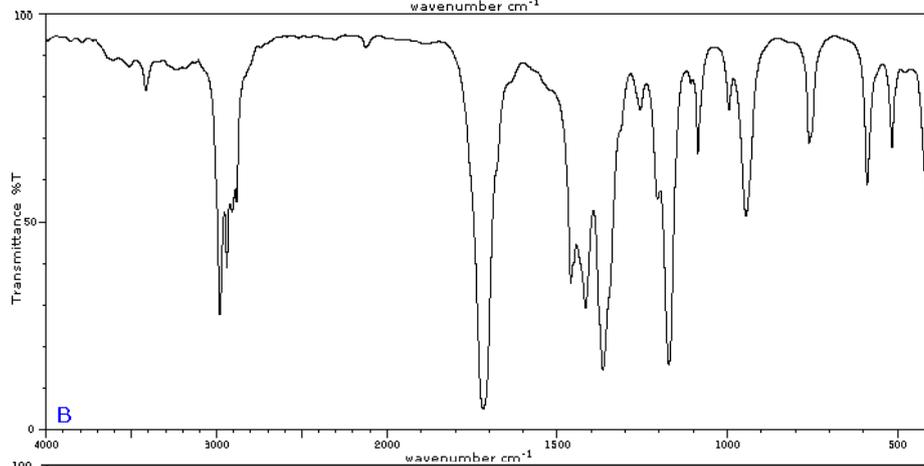
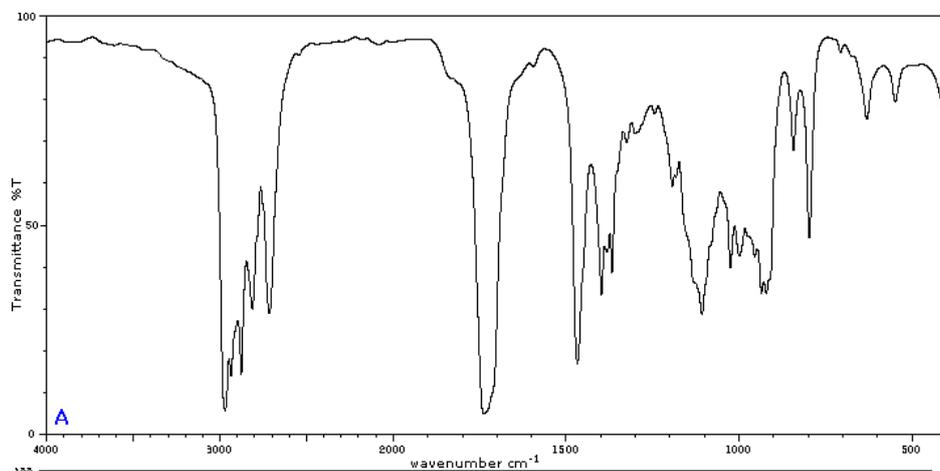


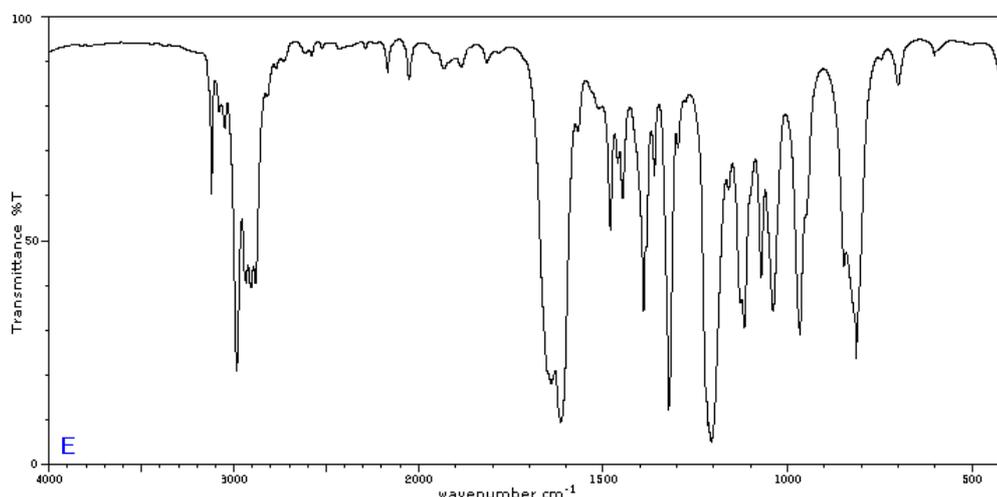
3) В ИК-спектре вещества найдены полосы: 3300, 2950, 2860, 2120, 1465, 1382. Какому соединению соответствует спектр?



4) Соотнесите 5 изомеров с брутто-формулой  $C_4H_8O$  с их ИК-спектрами, приведенными ниже.





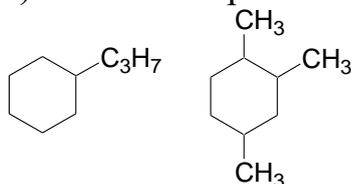


### Типовые задачи по ЯМР-спектроскопии:

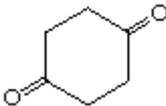
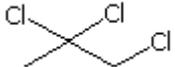
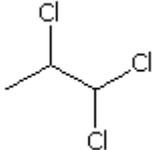
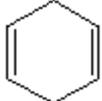
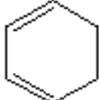
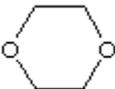
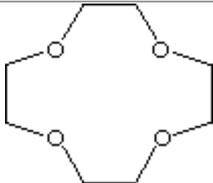
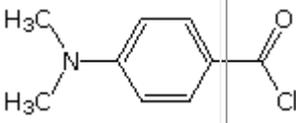
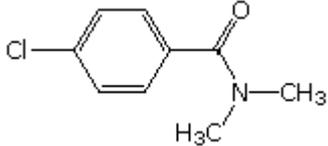
- 1) Определить тип спиновой системы: пропан, винилхлорид, 1,2-дихлорбензол, 1,1-дихлорпропан, пиридин, о-бромэтилбензоат, п-нитроанизол.
- 2) Изобразить предполагаемый вид спектра: метилэтиловый эфир, 1-иод-1-хлорэтилен, 1,1-дихлорбутанон-2, дифторэтан, 3-хлорбутанон-2, транс-2-бутеновая кислота.
- 3) По брутто-формуле и спектру определить структуру соединения: а)  $C_4H_{10}O_2$ , д 1.18, с 3.22, к 4.50; б)  $C_6H_{13}Cl$ , с 1.2, т 2.0, т 3.8; в)  $C_2H_6O_3S$ , с 3.6; г)  $C_3H_7O_2N$ , д 1.4, септет 4.6; д)  $C_6H_5O_3N$ , д 6.4, д 7.5, с 8.4; е)  $C_4H_9Br$ , д 1.0, м 2.0, д 3.3; ж)  $C_3H_6BrI$ , квинт. 1.8, т 3.55, т 3.65; з)  $C_4H_7OCl$ , с 2.2, т 2.9, т 3.7; и)  $C_7H_9N$ , с 2.1, с 3.2, д 6.4, д 6.8; к)  $C_6H_8O$ , с 1.9, с 5.4 – 3:1.

### Типовые задачи по масс-спектрометрии:

- 1) Объяснить происхождение пиков в масс-спектре электронного удара циануксусного эфира  $NC-CH_2-COOEt$ : 113, 86, 68, 45, 40, 29, 27.
- 2) Как можно различить по масс-спектрам изомеры?



- 3) Какие изотопные пики будут наблюдаться в области молекулярного иона для:  $C_2H_5BrO$ ,  $C_6O$ ,  $C_6H_4BrCl$ ? Допустить, что интенсивность молекулярного пика равна 100%. Привести возможные структуры этих соединений.
- 4) Какое из соединений с наибольшей вероятностью в качестве основного пика будет иметь в спектре пик  $m/z = 43$ ?  $CH_3(CH_2)_4CH_3$ ,  $(CH_3)_3CCH_2CH_3$ ,  $(CH_3)_2CHCH(CH_3)_2$ , циклогексан.
- 5) (комплексная) Какой спектральный метод (УФ, ИК, ЯМР  $^1H$ , масс-спектрометрия) позволит наиболее надёжно различить следующие пары соединений? Допустите, что у вас нет второго соединения для прямого сравнения их свойств.

	
	
	
	
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{OH}$	$(\text{CH}_3)_3\text{COH}$
$\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$	$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$
	

### **3.9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины по выбору**

#### **Основная литература**

1. Беляев, А. П. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс] : учебник / А. П. Беляев, В. И. Кучук ; ред. А. П. Беляев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Электрон. текстовые дан. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2012. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970422069.html>.
2. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс] : учебник / А. П. Беляев [и др.]; под ред. А. П. Беляева. - Электрон. текстовые дан. - М. : Гэотар Медиа, 2010. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970414415.html>.
3. Физическая и коллоидная химия : учебник для студ., обуч. по спец. 060108 (040500) - Фармация / А. П. Беляев [и др.]; под ред. А. П. Беляева. - М. : Гэотар Медиа, 2010. - 700 с.
4. Харитонов, Ю. Я. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебник для студ., обуч. по спец. 060301 «Фармация» по дисциплине "Физическая и коллоидная химия" / Ю. Я. Харитонов. - Электрон. текстовые дан. - М. : ГЭОТАР-МЕДИА, 2009. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970409589.html>

#### **Дополнительная литература**

1. Беляев, А. П. Физическая и коллоидная химия. Практикум обработки экспериментальных результатов [Электронный ресурс] : учебник / А. П. Беляев ; ред. А. П. Беляев. - Электрон. текстовые дан. - М. : ГЭОТАР-МЕДИА, 2015. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970434864.html>.
2. Ершов, Ю. А. Коллоидная химия. Физическая химия дисперсных систем [Электронный ресурс] : учебник / Ю. А. Ершов. - Электрон. текстовые дан. - М. : Гэотар Медиа, 2013. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970424285.html>.
3. Физическая и коллоидная химия: руководство к практ. занятиям [Электронный ресурс]: учеб. пособие / [А. П. Беляев и др.] ; под ред. А. П. Беляева. - Электрон. текстовые дан. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2012. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970422076.html>
4. Физическая и коллоидная химия. Задачник [Электронный ресурс] : учебное пособие для [фарм. фак.] вузов / А. П. Беляев [и др.] ; под ред. А. П. Беляева. - Электрон. текстовые дан. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2014. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970428443.html>.
5. Харитонов, Ю. Я. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебник / Ю. Я. Харитонов. - Электрон. текстовые дан. - М. : ГЭОТАР-МЕДИА, 2009. - on-line. - Режим доступа: <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970409589.html>.

### 3.10. Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины.

Использование учебных аудиторий, химических лабораторий, лабораторного и инструментального оборудования для работы обучающихся.

Мультимедийный комплекс (ноутбук, проектор, экран), мониторы. Наборы слайдов, таблиц/мультимедийных наглядных материалов по различным разделам дисциплины по выбору. Ситуационные задачи, тестовые задания по изучаемым темам. Доски. Использование компьютеров, компьютерных классов.

### 3.11. Образовательные технологии

Используемые образовательные технологии при изучении данной дисциплины: имитационные технологии: ситуация-кейс; неимитационные технологии: лекция (проблемная, визуализация), дискуссия (с «мозговым штурмом»).

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, составляет 15% интерактивных занятий от объема контактной работы.

Примеры интерактивных форм и методов проведения занятий: мультимедийная лекция, видео работы приборов.

Лекции, презентации, семинары в диалоговом режиме с элементами дискуссии, разбор конкретных проблемных ситуаций (из опыта мировых лабораторий и персональной студенческой практики), выступления с научными докладами на студенческой конференции. Возможно проведение мастер-классов специалистов спектральных лабораторий на базе ИОрХ УНЦ РАН.

### 3.12. Разделы дисциплины по выбору и междисциплинарные связи с последующими дисциплинами

п/п №	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	Разделы данной дисциплины, необходимые для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
		Спектроскопические методы исследования	Спектроскопия в ИК-области	Спектроскопия в УФ-области	Рамановская спектроскопия	Флуориметрия	Резонансные методы	Масс-спектрометрия	Рентгеноструктурный анализ	Расчетно-теоретические методы квантовой химии.
1.	Аналитическая химия	+	+	+	+	+	+	+	+	+
2.	Органическая химия	+	+	+	+	+	+	+	+	+
3.	Основы экологии и охраны природы	+	+							
4.	Фармацевтическая химия	+	+	+	+	+	+	+	+	+
5.	Фармакогнозия	+	+							
6.	Токсикологическая химия	+	+	+	+	+	+	+	+	+

#### **4. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ПО ВЫБОРУ:**

Обучение складывается из контактной работы (72 час.), включающей лекционный курс и практические занятия, и самостоятельные работы (36 час.). Основное учебное время выделяется на изучение теоретических основ методов исследования химических соединений.

При изучении дисциплины по выбору необходимо использовать, типовые задачи, ответы на тестовые задания, анализы спектров и освоить практические умения самостоятельно работать с учебной и справочной литературой по химии; собирать простейшие установки для проведения лабораторных исследований; табулировать экспериментальные данные, графически представлять их; проводить элементарную статистическую обработку экспериментальных данных в химических экспериментах; решать задачи и упражнения по установлению строения химических соединений; проводить расчеты по полученным результатам и делать выводы на их основании; прогнозировать строение химических соединений

Практические занятия проводятся в форме лабораторно-практических занятий в виде выполнения химического эксперимента, решения типовых задач, ответов на тестовые задания, анализа спектров.

В соответствии с требованиями ФГОС ВО в учебном процессе широко используются активные и интерактивные формы проведения занятий (имитационные и неимитационные технологии). Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, составляет не менее 15% от контактной работы.

Самостоятельная работа обучающихся подразумевает подготовку к занятиям и включает работу с учебной литературой по дисциплине по выбору и выполняется в пределах часов, отводимых на ее изучение в разделе СРО.

Каждому обучающемуся обеспечен доступ к библиотечным фондам университета и кафедры.

По дисциплине по выбору разработаны методические рекомендации для обучающихся и методические указания для преподавателей.

Исходный уровень знаний обучающихся определяется тестированием. Текущий контроль усвоения предмета определяется устным опросом в ходе занятий, решением типовых задач и ответов на тестовые задания.

В конце изучения учебной дисциплины проводится промежуточный контроль знаний с использованием тестового контроля, проверкой практических умений и решением типовых задач.