

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

*И. С.* Директор Института химии



*Т.А. Кремлева* Т.А. Кремлева

*2*» *марта* 2020 года

**ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ**

Рабочая программа  
для обучающихся по направлению  
04.06.01 Химические науки  
профиль (направленность): Органическая химия  
форма обучения: очная

Кулаков И. В. Инструментальные методы исследования. Рабочая программа для обучающихся по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки. Направленность: Органическая химия. Форма обучения: очная. Тюмень, 2020.

Рабочая программа дисциплины (модуля) опубликована на сайте ТюмГУ: Органическая химия [электронный ресурс] / Режим доступа: <https://www.utmn.ru/sveden/education/#>.

## 1. Пояснительная записка

### Цель дисциплины:

сформировать, закрепить и расширить у аспирантов знания в области современных инструментальных методов исследования, а также выработать системный подход к решению и анализу структурных и динамических задач в области изучения строения и других химических исследований органических соединений, полученных ранее на основе теоретических и практических знаний, что необходимо для эффективного освоения основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) по направлению 04.06.01 Химические науки (Органическая химия) и подготовки кандидатской диссертации.

### Задачи дисциплины:

- иметь прочные представления о возможностях и ограничениях использования современных физических методов исследования;
- уметь определить недостатки и преимущества приложения физических методов исследования в статичных и динамических явлениях химии;
- иметь точные представления о специфике и всех инструментальных возможностях каждого физического метода исследования;
- иметь возможность сформировать в качестве неперемного условия успешного применения физических методов исследования, необходимость получения и использования во взаимосвязи количественных макроскопических данных (частоты излучения или поглощения и их интенсивность) различных видов спектроскопии;
- уметь продемонстрировать в доказательной форме успешность комплексного применения различных методов физического исследования.

### 1.1. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина входит в блок Б1 Блок 1 «Дисциплины (модули)» (вариативная часть, обязательные дисциплины). Для успешного освоения данной дисциплины обучающиеся должны владеть теоретическими представлениями в области строения органических веществ, основами спектральных и хроматографических методов.

Пороговые знания и умения обучающегося:

**Знать:** теоретические основы спектральных и хроматографических методов исследования; структурные модели органических молекул.

**Уметь:** собирать и анализировать научную, технологическую и статистическую информацию; планировать экспериментальные научные исследования в области органической химии, обрабатывать экспериментальные данные, подготавливать к публикации статьи и тезисы докладов.

**Владеть:** современными методами экспериментальных исследований в области органической химии, методами математического моделирования, информационными технологиями, в т.ч. методами работы со специальными расчетными программами и электронными базами данных.

### 1.2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения данной дисциплины (модуля)

В результате освоения ОП выпускник должен обладать следующими компетенциями:  
ПК-2 - Способность использовать современную научную аппаратуру и методы физико-химического анализа, используемые при выполнении научных исследований в области органической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, поляриметрия, ЯМР, ЭПР, ИК, КР, УФ-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ).



ПК-3 - Способность грамотно представлять результаты научных исследований (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация) в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами, осуществлять преподавательскую деятельность по химическим и смежным дисциплинам.

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (знаниевые/функциональные)
ПК-2 - Способность использовать современную научную аппаратуру и методы физико-химического анализа, используемые при выполнении научных исследований в области органической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, поляриметрия, ЯМР, ЭПР, ИК, КР, УФ-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ)	<p>Знает основное серийное оборудование для каждого рассматриваемого физического метода исследования веществ (УФ-, ИК-, КР, ЭПР, ЯМР- спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ); математические алгоритмы и методы обработки первичных спектроскопических и спектрометрических данных.</p> <p>Умеет выбрать соответственно поставленной задаче исследования тот или иной вид спектроскопии (определить достоинства и недостатки, а также области применения); комбинировать в различных сочетаниях два и более спектральных методов для достижения полного определения структуры исследуемого вещества</p>
ПК-3 - Способность грамотно представлять результаты научных исследований (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация) в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами, осуществлять преподавательскую деятельность по химическим и смежным дисциплинам	<p>Знает основные методы представления и оформления результатов проведенных научных исследований, содержание и структуру научных статей, обзоров, докладов, презентаций, научных отчетов, кандидатской диссертации в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами; знает взаимосвязь органической химии с другими науками, методики преподавания химии</p> <p>Умеет применять полученные знания и опыт в оформлении научно-исследовательских результатов (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация), преподавании химических дисциплин.</p>

## 2. Структура и трудоемкость дисциплины

Таблица 1

Вид учебной работы		Всего часов	Часов в семестре
			5
<b>Общая трудоемкость</b>	<b>зач. ед.</b>	3	3
	<b>час</b>	108	108
Из них:			
<b>Часы аудиторной работы (всего):</b>		34	34
Лекции		10	10
Практические занятия		0	0
Лабораторные / практические занятия по подгруппам		24	24
<b>Часы внеаудиторной работы, включая самостоятельную работу обучающегося</b>		74	74
Вид промежуточной аттестации (зачет, диф. зачет, экзамен)			Зачет



### 3. Система оценивания

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине находится в Приложении 1.

Аспирант получает зачет по результатам работы в семестре.

Для получения зачета необходимо выполнить лабораторный практикум и запланированные контрольные работы.

При условии, что аспирант набирает за работу не менее 70 баллов, он получает зачет автоматически. В противном случае сдает его устно, по билетам.

Для получения зачета необходимо выполнить лабораторный практикум и запланированные контрольные работы.

### 4. Содержание дисциплины

#### 4.1. Тематический план дисциплины

Таблица 2

*Форма тематического плана для очной формы обучения*

№ п/п	Наименование тем и/или разделов	Объем дисциплины (модуля), час				
		Всего	Виды аудиторной работы (академические часы)			Иные виды контак тной работы
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные / практические занятия по подгруппам	
1	2	3	4	5	6	7
1	Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях	8	2	0	0	
2	Методы электронной УФ-спектроскопии	10	0	0	4	
3	Методы колебательной (ИК) спектроскопии	8	2	0	0	
4	ИК-спектроскопия	10	0	0	4	
5	Резонансные методы на примере ЯМР	8	2	0	0	
6	ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ спектроскопия. ч.1.	10	0	0	4	
7	Резонансные методы на примере ЯМР	10	2	0	0	
8	ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ спектроскопия. ч.2.	10	0	0	4	
9	Методы масс- и хромато-масс-спектрометрии	10	2	0	0	
10	Хромато-масс-спектрометрия. ч.1	10	0	0	4	
11	Хромато-масс-спектрометрия. ч.2	10	0	0	4	
12	Консультация перед зачетом	2				2
13	Зачет по дисциплине "Инструментальные методы исследования"	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	108	10	0	24	

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля) по темам



## Планы лекционных занятий

### Тема 1. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях

Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация и отнесение электронных переходов, их энергии. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул. Хромофоры и ауксохромы, квантовый выход, сдвиг Стокса. О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.

### Тема 2. Методы колебательной (ИК) спектроскопии

Резонанс Ферми. Отнесение частот валентных колебаний. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Исследование межмолекулярных и внутримолекулярных водородных связей методом ИК-спектроскопии. Специфичность и характеристичность колебательных спектров. Техника и методики ИК спектроскопии. Аппаратура ИК спектроскопии, приготовление образцов. Области поглощения некоторых структурных элементов. Условное деление области спектра на область функциональных групп и область «отпечатков пальцев». Экспериментальные данные по ИК-спектрам поглощения классов органических соединений.

### Тема 3. Резонансные методы на примере ЯМР

Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условие ядерного магнитного резонанса. Магнитное экранирование и химический сдвиг протонов. Полуэмпирические соотношения между химическим сдвигом и строением молекулы. Типы вкладов в химический сдвиг. Электронное влияние заместителей, молекулярные магнитные поля за счет удаленных связей, молекулярные электрические поля за счет постоянных диполей, взаимодействие электронов через пространство. Влияние внешних воздействий на химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, влияние различных факторов на константу спин-спинового взаимодействия (КССВ). Применение метода селективного подавления спин-спинового взаимодействия (облучения) и «двойного резонанса» в ЯМР-спектроскопии. Спектроскопия ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Особенности и тонкости метода. Некоторые аспекты, связанные с отличием от спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$ . Константы углерод-протонного спин-спинового взаимодействия. Методы усиления сигнала при исследовании ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Ядерный эффект Оверхаузера (ЯЭО или NOE). Методы подавления углерод-протонного спин-спинового взаимодействия. Спектры АРТ (Attached Proton Test) и DEPT (Distortion Enhancement by Polarization Transfer).

Понятие о двумерных 2D-спектрах (корреляционная спектроскопия ЯМР). Применение спин-спиновых взаимодействий гомо- и гетероядерной природы на примере двумерных спектров в форматах корреляций COSY (Correlation Spectroscopy – корреляционная спектроскопия,  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ). Эксперимент НМҚС (Heteronuclear Multiple Quantum Correlation – многоквантовая гетероядерная корреляция,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ). Эксперимент НМВС (Heteronuclear Multiple Bond Coherence – гетероядерная когерентность через несколько связей,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ).

Применение спектров ЯМР в установлении строения соединений и изучении динамических эффектов органических соединений. Исследование межмолекулярных, внутримолекулярных водородных связей методом ЯМР-спектроскопии. Применение ЯМР-спектроскопии в исследовании таутомерных превращений и количественного состава изомеров (таутомеров). Диастереотопность атомов водорода, причины и обнаружение в спектрах ЯМР.

### Тема 4. Методы масс- и хромато-масс-спектрометрии



Физические основы масс-спектрометрии. Электронный удар и химическая ионизация молекул. Теория масс-спектрометрического распада. Энергия ионизации. Молекулярный ион. Типы ионов в масс-спектрометрии. Зависимость интенсивности пика молекулярного иона от величины энергии ионизации.

Газовая хромато-масс-спектрометрия в органической химии. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров. Библиотеки и базы масс-спектров органических соединений. Принятый стандарт электронного удара.

Методы ионизации: электронный удар, химическая ионизация, фотоионизация, электроспрей, лазерная десорбция (метод MALDI), полевая десорбция/ионизация. Преимущества и недостатки методов. Комбинированные методы. Техника эксперимента и современное аналитическое ГХ-МС оборудование. Разрешающая способность масс-спектрометра. Масс-спектрометрия ВР (Высокого разрешения).

Применение масс-спектрометрии при идентификации вещества. Решение задач качественного и количественного анализа при масс-спектрометрическом исследовании.

## Планы практических (лабораторных) занятий

### 1. Методы электронной УФ-спектроскопии

**Лабораторная работа № 1.** Тема работы: Снятие спектральных характеристик (спектры поглощения и флуоресценции) разбавленного раствора определенного органического вещества при помощи УФ-спектрометра. Расчет квантового выхода флуоресценции и сдвиг Стокса.

### 2. ИК-спектроскопия

**Лабораторная работа № 2.** Тема работы: Установление возможной структуры органического вещества при помощи ИК-спектроскопии. Объект исследования: образец чистого органического вещества определенного класса (ароматическая карбоновая кислота, амид, амин, спирт, сложный эфир, альдегид либо кетон). Используемые методы: снятие ИК-спектров, их обработка и интерпретация. Решение задач по ИК-спектроскопии.

### 3. ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ спектроскопия

**Лабораторная работа № 3.** Тема работы: Спектры ЯМР  $^1\text{H}$ . Основные характеристики спектров ЯМР. Решение задач на установление структуры неизвестного вещества по его ПМР-спектру.

Спектры ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Методы усиления сигнала при исследовании ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Методы подавления углерод-протонного спин-спинового взаимодействия. Решение задач на установление структуры неизвестного вещества по его  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектрам

**Лабораторная работа № 4.** Тема работы: Корреляционная (двумерная 2D) спектроскопия ЯМР. Совместное применение спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и специальных методов и форматов для решения сложных задач на определение структуры неизвестного соединения. Решение задач.

### 4. Хромато-масс-спектрометрия

**Лабораторная работа № 5.** Тема работы: Основные понятия масс-спектрометрии для интерпретации спектров МС: молекулярный пик, осколочный ион, фрагментация. Качественный и количественный анализ. Особенности фрагментации различных классов органических соединений. Установление классов соединений и изотопного состава по масс-спектрам.

Используемые методы: отбор проб из реакционной среды, химический анализ продуктов реакции, определение конверсии и выходов продуктов по результатам хромато-масс-спектрометрии.



## 5. Учебно-методическое обеспечение и планирование самостоятельной работы обучающихся

Таблица 3

№ Темы	Темы	Виды СРС
	5 семестр	
	Инструментальные методы исследования	
1	Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях	Чтение обязательной и дополнительной литературы
2	Методы электронной УФ-спектроскопии	Проработка лекций
3	Методы колебательной (ИК) спектроскопии	Чтение обязательной и дополнительной литературы
4	ИК-спектроскопия	Проработка лекций
5	Резонансные методы на примере ЯМР	Чтение обязательной и дополнительной литературы
6	ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ спектроскопия	Проработка лекций
7	Резонансные методы на примере ЯМР	Чтение обязательной и дополнительной литературы
8	ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ спектроскопия	Проработка лекций
9	Методы масс- и хромато-масс-спектрометрии	Чтение обязательной и дополнительной литературы
10	Хромато-масс-спектрометрия	Проработка лекций
11	Хромато-масс-спектрометрия	Проработка лекций
12	Консультация перед зачетом	Самостоятельное изучение заданного материала
13	Зачет по дисциплине "Инструментальные методы исследования"	Самостоятельное изучение заданного материала

## 6. Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю)

### 6.1 Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

Форма проведения промежуточной аттестации – зачет. Аспирант получает зачет по результатам работы в семестре.

Для получения зачета необходимо выполнить лабораторный практикум и запланированные контрольные работы.

При условии, что аспирант набирает за работу не менее 70 баллов, он получает зачет автоматически. В противном случае сдает зачет. Зачёт проводится устно (по билетам) в форме собеседования и/или письменных комментариев к задаче по прилагаемому ниже примерному перечню вопросов.

#### Перечень примерных вопросов для зачета:

1. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях.
2. Электронные энергетические уровни и переходы – область исследования методом УФ-спектроскопии.



3. Хромофоры. Ауксохромы. Батохромный и гипсохромный сдвиг максимума поглощения в УФ-спектроскопии.
4. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.
5. Локализация диапазона ИК- спектроскопии в общей шкале электромагнитного излучения. Понятие о волновом числе. Соотношение частоты, длины волны и волнового числа.
6. Многоатомные молекулы. Число степеней свободы, связанных с колебательными движениями. Колебательные спектры трехатомных молекул. Деформационные колебания.
7. Схема ИК-спектрофотометра и принципы работы прибора. Эффективные характеристики прибора.
8. Требования к образцу и его подготовка к анализу. Ограничения.
9. Деление ИК-спектра на отдельные области. Условность деления. Значение для интерпретации. Факторы, усложняющие вид полос поглощения.
10. Оценка интенсивности полос поглощения в ИК-спектроскопии и ее роль при интерпретации спектров. Факторы влияния на интенсивность.
11. Межмолекулярные эффекты и характеристические частоты групп.
12. Внутримолекулярные факторы и характеристические частоты.
13. Исследование межмолекуляр-ных и внутримолекулярных водородных связей методом ИК-спектроскопии.
14. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, константа спин-спинового взаимодействия. Влияние различных факторов на константу ССВ.
15. Применение метода селективного подавления спин-спинового взаимодействия (облучения) и «двойного резонанса» в ЯМР-спектроскопии.
16. Методы усиления сигнала при исследовании ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Ядерный эффект Оверхаузера (ЯЭО или NOE). Методы подавления углерод-протонного спин-спинового взаимодействия. Спектры АРТ (Attached Proton Test) и DEPT (Distortion Enhancement by Polarization Transfer).
17. Спектроскопия ЯМР  $^{13}\text{C}$ . Особенности и тонкости метода. Некоторые аспекты, связанные с отличием от спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$ . Константы углерод-протонного спин-спинового взаимодействия.
18. Понятие о двумерных 2D-спектрах (корреляционная спектроскопия ЯМР). Применение спин-спиновых взаимодействий гомо- и гетероядерной природы на примере двумерных спектров в форматах корреляций COSY (Correlation Spectroscopy – корреляционная спектроскопия,  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ).
19. Эксперимент НМҚС (Heteronuclear Multiple Quantum Correlation – многоквантовая гетероядерная корреляция,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ )
20. Эксперимент НМВС (Heteronuclear Multiple Bond Coherence – гетероядерная когерентность через несколько связей,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ).
21. Применение спектров ЯМР в установлении строения соединений и изучении динамических эффектов органических соединений.
22. Исследование межмолекуляр-ных, внутримолекулярных водородных связей методом ЯМР-спектроскопии.
23. Применение ЯМР-спектроскопии в исследовании таутомерных превращений и количественного состава изомеров (таутомеров).
24. Диастереотопность атомов водорода. Причины, обнаружение в спектрах ЯМР.
25. Физические основы масс-спектрометрии.
26. Теория масс-спектрометрического распада.
27. Электронный удар и химическая ионизация молекул.
28. Газовая хромато-масс-спектрометрия в органической химии.
29. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров.
30. Библиотеки и базы масс-спектров органических соединений. Принятый стандарт электронного удара.



31. Решение задач качественного и количественного анализа при масс-спектрометрическом исследовании.

32. Масс-спектрометрия ВР (Высокого разрешения).

33. Техника эксперимента и современное аналитическое ГХ-МС оборудование. Развитие метода.

34. Матричная лазерная десорбционная ионизация, метод MALDI. Применение масс-спектрометрии при идентификации вещества.

## 6.2 Критерии оценивания компетенций:

Таблица 4

Карта критериев оценивания компетенций

№ п/п	Код и наименование компетенции	Оценочные материалы	Критерии оценивания	
1	ПК-2 - Способность использовать современную научную аппаратуру и методы физико-химического анализа, используемые при выполнении научных исследований в области органической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, поляриметрия, ЯМР, ЭПР, ИК, КР, УФ-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ)	Реферат, доклад, презентация, устный (или письменный) ответ на зачете	<b>Оценка «зачтено»</b> Сформированное представление о методах применения и использования современной научной аппаратуры и физико-химического анализа при выполнении научных исследований в области органической химии. Сформированное умение применять на практике методы анализа в научно-исследовательской деятельности	<b>Оценка «не зачтено»</b> Частичное, фрагментарное представление о методах применения и использования современной научной аппаратуры и физико-химического анализа при выполнении научных исследований в области органической химии. Частично освоенное умение применять на практике методы анализа в научно-исследовательской деятельности
2	ПК-3 - Способность грамотно представлять результаты научных исследований (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация) в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами, осуществлять	Реферат, доклад, презентация, устный (или письменный) ответ на зачете	<b>Оценка «зачтено»</b> Сформированные знания об основных формах представления результатов научных исследований (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация); методах преподавания химии. Сформированное	<b>Оценка «не зачтено»</b> Частичные, фрагментарные знания об основных формах представления результатов научных исследований; методах преподавания химии. Частично освоенное умение представления основных результатов научных исследований



преподавательскую деятельность по химическим и смежным дисциплинам		умение представить основные результаты научных исследований	
--	--	---	--

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

### 7.1 Основная литература:

1. Луков, В. В. Физические методы исследования в химии : учебное пособие / В. В. Луков, И. Н. Щербаков. — Ростов-на-Дону : ЮФУ, 2016. — 216 с. — ISBN 978-5-9275-2023-7. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/114513> (дата обращения: 06.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

2. Каныгина, О.Н. Физические методы исследования веществ / О.Н. Каныгина, А.Г. Четверикова, В.Л. Бердинский ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Кафедра общей физики. - Оренбург: ОГУ, 2014. - 141 с. : схем., табл., ил. - Библиогр. в кн.; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=330539>

3. Моргунов, Р. Б. Физико-химические методы исследования : монография / Р. Б. Моргунов, О. В. Коплак, А. И. Дмитриев. — Москва : ЕАОИ, 2013. — 394 с. — ISBN 978-5-374-00571-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/126585> (дата обращения: 06.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Лебедев, А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии : учебное пособие / А. Т. Лебедев. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Техносфера, 2015. — 704 с. — ISBN 978-5-94836-409-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/110953> (дата обращения: 06.02.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

### 7.2 Дополнительная литература:

5. Бёккер Ю. Спектроскопия. [Электронный ресурс]: М.: РИЦ "Техносфера", 2009, 528 – Режим доступа: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=88994&razdel\\_red=215](http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=88994&razdel_red=215)

6. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений: [учеб. пособие для вузов] / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл ; пер. с англ. д-ра хим. наук, проф. Н. М. Сергеева, канд. хим. наук Б. Н. Тарасевича. - М. : Бином. Лаборатория Знаний, 2012. - 557 с.

7. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высшая школа, 1984, - 336с.

8. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир-АСТ, 2003, - 683 с.

9. Ионин Б.И., Ершов Б.А., Кольцов А.И. ЯМР-спектроскопия в органической химии. Л.: Химия, 1983, -272 с.

10. Казицина Л.А., Куллетская И.Б. Применение ИК, УФ, ЯМР и масс-спектропии в органической химии». М.: МГУ, 1979, - 264 с.

### 7.3 Интернет – ресурсы и периодические издания:

Общий информационный поиск необходимой литературы можно осуществлять на доступных интернет-ресурсах <http://rushim.ru/books/spectroscopia/spectroscopia.htm> . Портал фундаментального химического образования в России. Наука. Образование. Технологии. [www.chemnet.ru](http://www.chemnet.ru) , <http://chemport.ru/>

### 7.4. Современные базы данных и информационные справочные системы:



Для поиска необходимой литературы, научных статей и другой информации используются информационные справочные системы, в том числе и Электронно-библиотечные системы (ЭБС), находящиеся в подписке ТюмГУ, например, ЭБС Лань (<https://e.lanbook.com/>), МЭБ (<https://icdlib.nspu.ru/>); НЭБ (<https://rusneb.ru/>); Базы данных, доступные в рамках национальной подписки: *American Chemical Society* (<https://www.acs.org/content/acs/en.html>); *Cambridge University Press* (<https://www.cambridge.org/core>); *Royal Society of Chemistry* (<https://pubs.rsc.org/>); журналы издательства *Wiley* (<https://onlinelibrary.wiley.com>). Другие базы данных, находящиеся в свободном доступе в сети Интернет, в частности, ScienceDirect, Wileylibrary, PubChem и Google Scholar, а также базы данных Reaxys и SciFinder.

#### **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю):**

В качестве основного программного обеспечения дисциплины «Инструментальные методы исследования» для решения расчетных прямых задач по ЯМР-спектрам органических соединений с известным строением и расшифровки данных fid-файлов, полученных ЯМР-спектрометром при регистрации  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ -спектров (при обратном решении задачи) будут весьма полезны пакеты прикладных программ: программный комплекс ACDLabs (ACD/NMR Processor Academic Edition) (академическая версия доступна на сайте производителя [http://www.acdlabs.com/resources/freeware/nmr\\_proc/](http://www.acdlabs.com/resources/freeware/nmr_proc/)) и ChemBioDraw (пробная версия доступна на сайте <http://scistore.cambridgesoft.com/ScistoreSoftwareDisplay.aspx?Trial=Trial/>).

Использование типовых компьютерных программ (Excel, Word, PowerPoint) для решения вычислительных задач, составления отчетов и презентаций.

Платформа для электронного обучения *Microsoft Teams*

#### **9. Технические средства и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

Для чтения лекций необходимо наличие аудиторий, оснащенных мультимедийной техникой (компьютер, проектор и др.).

Для проведения лабораторных (практических) занятий имеется специализированное оборудование (ИК, УФ-, хромато-масс спектрометры.)

Для самостоятельной работы студентов необходим доступ в компьютерный класс, имеющий выход в Интернет.

Материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включает в себя: учебные лаборатории органического синтеза (ауд. 106 корп. 5А), (ауд. 102, корп. 5А), (ауд. 115, корп. 5А), учебно-научные лаборатории НОЦ «Химическая экспертиза и экологическая безопасность» (ауд. 116 и 117, корп. 5А), лаборатория экологических исследований (ауд. 101, корп. 5А). Лаборатории оснащены необходимыми приборами, в том числе и современным научным оборудованием и приборами (собственное оборудование ЦКП) - газовый хроматограф Trace GC Ultra (Thermo Electron) с масс-селективным детектором DSQ II; Газовый хроматограф с масс-селективным детектором SCION SQ (Bruker); Спектрофлуориметр RF 5301 PC (Shimadzu); Жидкостный хроматограф Agilent 1200 (Agilent Technologies) с тандемным квадрупольным масс-спектрометром с источником ионизации электроспрей и химической ионизацией под атмосферным давлением Applied Biosystems/MDS Sciex API 2000 LC/MS/MS (Applied Biosystems); Аппаратно-программный комплекс «Кристалл 5000.2» на базе газовых хроматографов с системой захлаживания термостата и программой обработки «Хроматэк\_ДНА» (Хроматэк); Абсорбционный спектрофотометр УФ- и видимой области Agilent 8453 (Agilent Technologies); Жидкостной хроматограф с диодно-матричным детектором Agilent 1100 (Agilent Technologies); ИК-Фурье спектрометр Agilent Cary 630 FTIR; Двухлучевой УФ-, ВИД-спектрофотометр Shimadzu UV-



2600; Хроматомасс-спектрометр Agilent 5977B GC/MSD с многофункциональной системой для пиролитической хроматографии EGA/PY-3030D (Frontier, Япония); Система жидкостной хроматографии Agilent 1260 Infinity II с времяпролетным масс-спектрометром высокого разрешения Agilent 6545B Q-TOF).

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор Института химии



*Т.А. Кремлева* Т.А. Кремлева

*2* » *марта* 2020 года

**ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Рабочая программа  
для обучающихся по направлению  
04.06.01 Химические науки  
профиль (направленность): Органическая химия  
форма обучения: очная



Кулаков И. В. Химия элементоорганических соединений. Рабочая программа для обучающихся по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, профиль (направленность) программы: Органическая химия, форма обучения очная. Тюмень, 2020.

Рабочая программа дисциплины (модуля) опубликована на сайте ТюмГУ: Химия элементоорганических соединений [электронный ресурс] / Режим доступа: <https://www.utmn.ru/sveden/education/#>.

© Тюменский государственный университет, 2020.

© Кулаков И. В., 2020.

## **1. Пояснительная записка**

### **Цель дисциплины:**

изучение истории развития, современного состояния и перспективных направлений элементарноорганической химии, практики получения и применения элементарноорганических соединений в тонком органическом синтезе, что необходимо для эффективного освоения основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) по направлению 04.06.01 Химические науки (Органическая химия) и подготовки кандидатской диссертации.

### **Задачи дисциплины:**

ознакомление с историей развития элементарноорганической химии и ее современное состояние;

понимание роли и значения элементарноорганических соединений в органическом синтезе и в других различных областях производства и научных исследований;

знание теоретических и методологических проблем современной элементарноорганической химии, перспективных направлений ее развития;

использование методов физико-химического анализа в установлении структуры элементарноорганических соединений и решения других задач.

### **1.1. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Данная дисциплина входит в блок Б1 Блок 1 «Дисциплины (модули)» (вариативная часть, обязательные дисциплины). Для успешного освоения данной дисциплины обучающиеся должны владеть теоретическими и практическими представлениями в области синтеза и строения органических веществ.

Пороговые знания и умения обучающегося:

#### **Знать:**

Специфику элементарноорганических молекул, теоретические знания об особенностях химических связей и строении элементарноорганических соединений, сходстве и различии этих веществ с органическими и неорганическими аналогами.

#### **Уметь:**

Анализировать зависимость свойств ЭОС от положения элемента в Периодической системе, устанавливать основные факторы строения, определяющие реакционную способность элементарноорганических молекул, использовать критерии истинности механизмов их реакций.

#### **Владеть:**

Приемами установления зависимости реакционной способности молекул от их структуры. Основными понятиями о методах синтеза и функционализации органических производных элементов. Методами установления строения молекул на основе данных спектральных исследований.

### **1.2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения данной дисциплины (модуля)**

В результате освоения ОП выпускник должен обладать следующими компетенциями:

ПК-10 - Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности), владением технологией мониторинга педагогических нововведений

ПК-11 - Способность использовать современную научную аппаратуру и методы физико-химического анализа, используемые при выполнении научных исследований в области органической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, поляриметрия, ЯМР, ЭПР, ИК, КР, УФ-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ).



Код и наименование компетенции	Компонент (знаниевый/функциональный)
ПК-10 - Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности), владением технологией мониторинга педагогических нововведений	Знает цели, методы и специфику элементоорганической химии, особенности химических связей и строения элементоорганических соединений. Имеет представление о сходстве и различии этих веществ с органическими и неорганическими аналогами.
	Умеет применять теоретические знания в учебной и профессиональной, в том числе и научно-исследовательской, деятельности.
ПК-11 - Способность использовать современную научную аппаратуру и методы физико-химического анализа, используемые при выполнении научных исследований в области органической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, поляриметрия, ЯМР, ЭПР, ИК, КР, УФ-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ)	Знает основное серийное оборудование для каждого рассматриваемого физического метода исследования веществ (УФ-, ИК-, КР, ЭПР, ЯМР- спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ); математические алгоритмы и методы обработки первичных спектроскопических и спектрометрических данных.
	Умеет выбрать соответственно поставленной задаче исследования тот или иной вид спектроскопии (определить достоинства и недостатки, а также области применения); комбинировать в различных сочетаниях два и более спектральных методов для достижения полного определения структуры исследуемого вещества

## 2. Структура и трудоемкость дисциплины

Таблица 1

Вид учебной работы		Всего часов	Часов в семестре
			5
<b>Общая трудоемкость</b>	зач. ед.	4	4
	час	144	144
Из них:			
<b>Часы аудиторной работы (всего):</b>		44	44
Лекции		24	24
Практические занятия		0	0
Лабораторные / практические занятия по подгруппам		20	20
<b>Часы внеаудиторной работы, включая самостоятельную работу обучающегося</b>		100	100
Вид промежуточной аттестации (зачет, диф. зачет, экзамен)			Зачет

## 3. Система оценивания

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине находится в Приложении 1.

Аспирант получает зачет по результатам работы в семестре.

Для получения зачета необходимо выполнить лабораторный практикум и запланированные контрольные работы.

При условии, что аспирант набирает за работу не менее 70 баллов, он получает зачет автоматически. В противном случае сдает его устно, по билетам.

Для получения зачета необходимо выполнить лабораторный практикум и запланированные контрольные работы.

#### 4. Содержание дисциплины

##### 4.1. Тематический план дисциплины

Таблица 2

Форма тематического плана для очной формы обучения

№ п/п	Наименование тем и/или разделов	Объем дисциплины (модуля), час				
		Всего	Виды аудиторной работы (академические часы)			Иные виды контакт ной работы
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные / практические занятия по подгруппам	
1	2	3	4	5	6	7
1	Специфика, структура и реакционная способность элементоорганических молекул	20	4	0	0	
2	Проведение реакции Гриньяра. Синтез трифенилкарбинола	4	0	0	4	
3	Представления о взаимосвязи между строением и реакционной способностью ЭОС	20	4	0	0	
4	Применение бромистого алюминия в реакции Фриделя-Крафтса	4	0	0	4	
5	Органические производные элементов I, II и III групп	20	4	0	0	
6	Темплатный синтез	4	0	0	4	
7	Органические производные элементов IV группы	20	4	0	0	
8	Синтез прекурсора по реакции Виттига	4	0	0	4	
9	Фосфорорганические соединения (ФОС)	20	4	0	0	
10	Этиловый эфир коричной кислоты (реакция Виттига)	4	0	0	4	
11	Органические производные переходных металлов	20	4	0	0	
12	Консультация перед зачетом	2	0			2
13	Зачет по дисциплине «Химия элементоорганических соединений»	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	144	24	0	20	2



## 4.2. Содержание дисциплины (модуля) по темам

### Планы лекционных занятий

#### **Тема 1. Специфика, структура и реакционная способность элементоорганических молекул**

Специфика элементоорганических молекул и их реакций. Область элементоорганической химии и ее место в ряду других химических дисциплин. Химические связи в органических и элементоорганических соединениях. Характер связи углерод-элемент в зависимости от положения элемента в Периодической системе. Многоцентровые многоэлектронные связи. Структура элементоорганических молекул и их реакционная способность.

Пространственная и электронная структура ЭОС, их взаимообусловленность. Классификация органических производных непереходных и переходных металлов.

#### **Тема 2. Представления о взаимосвязи между строением и реакционной способностью ЭОС**

Общий анализ электронной и пространственной структуры органических производных элементов как функции положения элемента в Периодической системе.

Особенности реакционной способности ЭОС: концепция электроотрицательности, метастабильные и гипервалентные структуры. Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей.

#### **Тема 3. Органические производные элементов I, II и III групп**

Структура органических производных элементов I, II и III групп.

Методы синтеза, электронодефицитные структуры. Свойства и различия органических производных лития, натрия, магния и ртути. Реакции замещения, присоединения по гомо- и гетероатомным кратным связям. Цинкорганические соединения: синтез, использование в органическом синтезе. Структура гидридов и алкилпроизводных бора и алюминия. Электронодефицитность, Al-комплексы. Реакции гидро- и карбоалюминирования. Соединения бора и алюминия в органическом синтезе. Каталитические свойства производных алюминия. Реакция Фриделя –Крафтса. Стереорегулярная полимеризация на катализаторах Циглера-Натта. Реакция Сузуки.

#### **Тема 4. Органические производные элементов IV группы**

Общая характеристика, изменения характера связи и свойств молекул в группе. Кремнийорганические соединения: гидриды, алкильные производные, соединения со связью кремний - гетероатом. Проблема "кремниевой жизни". Силоксаны, металлосилоксаны. Соединения низшей и высшей координации. Роль гипервалентных интермедиатов в реакциях присоединения элиминирования в химии кремнийорганических соединений. Реакция Симмонса-Смита.

#### **Тема 5. Фосфорорганические соединения (ФОС)**

Структурные и электронные характеристики основных типов ФОС. Фосфаалкины, фосфаалкены, фосфины, фосфиты, фосфораны. Реакции Арбузова, Михаэлиса - Беккера, Пудовика, Абрамова, Кабачника - Филдса. Производные кислот фосфора и проблема химической безопасности. Токсичные соединения фосфора: пестициды, лекарственные препараты, ядохимикаты, рострегуляторы.

Химическое оружие, экологические проблемы.

#### **Тема 6. Органические производные переходных металлов**



Одноэлектронные лиганды, реакционная способность сигма-комплексов. Олефиновые комплексы и их применение в промышленном органическом синтезе. Диеновые комплексы, циклобутadiен и проблема ароматичности. Циклопентадиенильные комплексы и ареновые комплексы, сендвичевые структуры. Промышленный металлокомплексный катализ. Реакции восстановления, хиральные катализаторы и стереоконтролируемые процессы и проблема безопасности.

### Планы практических (лабораторных) занятий

#### Лабораторная работа № 1. Проведение реакции Гриньяра. Синтез трифенилкарбинола.

Трифенилкарбинол получается в результате взаимодействия магнийбромфенила с этиловым эфиром бензойной кислоты, причем с молекулой эфира последовательно реагируют 2 молекулы магнийорганического соединения.

Реактивы:

Бромбензол.....19 г (0,12 моля)

Бензойноэтиловый эфир.....7,5 г (0,05 моля)

Магний металлический (стружки).....3 г (0,12 моля)

Абсолютный эфир; иод; хлористый аммоний; спирт

В круглодонную колбу емкостью 250-300 мл помещают магний и кристаллик иода и, приливая раствор бромбензола в 50 мл абсолютного эфира, получают фенилмагнийбромид, как было описано при дифенилкарбиноле.

К охлажденному раствору фенилмагнийбромида через капельную воронку прибавляют по каплям раствор бензойноэтилового эфира в 10 мл абсолютного эфира и затем нагревают на водяной бане в течение 1 часа (эфир должен слабо кипеть). Охлаждают колбу, погружая ее в баню с ледяной водой, и разлагают продукт присоединения насыщенным раствором 15 г хлористого аммония. Раствор хлористого аммония постепенно приливают через капельную воронку при перемешивании жидкости.

От реакционной смеси отгоняют с водяным паром эфир, бромбензол (взятый в небольшом избытке) и дифенил (побочный продукт реакции). Оставшийся в колбе трифенилкарбинол (в виде зернистой массы желтого цвета) отсасывают и перекристаллизовывают из горячего спирта (около 50 мл); трифенилкарбинол кристаллизуется в виде бесцветных призм. Выход около 10 г. Т. пл. 162° С.

#### Лабораторная работа № 2. Применение бромистого алюминия в реакции Фриделя-Крафтса. Синтез 1-(1,1'-бифенил)-4-ил)этан-1-она.

В трёхгорлую колбу емкостью 250 мл наливают 100 мл хлористого метилена, добавляют 29,65 г (0,011 моль) безводного  $AlBr_3$  при охлаждении и перемешивании. Затем добавляют при 5–8 оС 7,25 мл (0,07 моль) хлористого ацетила. После чего прикапывают раствор 15,5 г (0,1 моль) бифенила в 40 мл хлористого метилена и реакционную смесь перемешивают при охлаждении еще в течение 3-х часов. Содержимое колбы выливают в стакан с водой и льдом. Водный слой отделяют на делительной воронке и промывают несколько раз. Сушат над безводным сульфатом натрия. Хлористый метилен отгоняют при пониженном давлении. Образовавшиеся кристаллы перекристаллизовывают из гексана. Получают 19,60 г (99 %) кристаллического вещества бежевого цвета с  $T_{пл.} = 118-120^{\circ}C$ .

#### Лабораторная работа № 3. Темплатный синтез

Катализируемое никелем (II) образование гетеромакроцикла. Реакция образования семичленного кольца циклоцианина из одной молекулы ацетилацетона и о-фенилендиамина при наличии ионов никеля приводит к 14-членному гетероциклу, который образуется из двух молекул аддукта первоначальной реакции. При этом аддукт координируется с ионом переходного металла, образуя «темплат», который направляет последующую



циклоконденсацию, причем образуется никелевый комплекс 14-членного макроцикла дигидродибензотетрааза[14]аннулена.

В 50 мл дегазированного метанола вносят в атмосфере азота 5,0 г (0,201 ммоль) тетрагидрата ацетата никеля (II), 4,3 г (0,402 ммоль) ацетилацетона и 4,35 г (0,402 ммоль) о-фенилендиамина и реакционную смесь в течение 4 ч кипятят с обратным холодильником. По осаждении смеси на бане со льдом образовавшиеся темные кристаллы отфильтровывают, промывают охлажденным до 0 °С метанолом (3x5 мл) и после высушивания в вакууме получают 2,67 г (33%) 5,7,12,14-тетраметилдibenzo[b,i][1,4,8,11]тетраазабисциклопентадекагексаенатоникеля (II) в виде темно-зеленого кристаллического порошка с Тпл. 254-256 °С.

#### Лабораторная работа № 4. Синтез прекурсора по реакции Виттига

Синтез реагента Виттига - Этил(трифенилфосфоранилиден)ацетат

Методика синтеза и выделения [ Organic synthesis. An Annual Publication of Satisfactory Methods for the Preparation of Organic Chemicals. New York: John Wiley & Song, Inc. 1984. V. 62. P. 203.]

В двугорлую колбу, снабженную термометром и обратным холодильником, помещают толуол (40 мл), трифенилфосфин (13 г) и нагревают смесь до полного растворения фосфина. Нагрев выключают и при 60 °С при хорошем перемешивании к раствору прибавляют этилбромацетат (8,4 г). После завершения экзотермической реакции смесь перемешивают при 40 °С 1 ч, охлаждают, а выпавшие кристаллы отфильтровывают на воронке Бюхнера, промывают толуолом (20 мл), петролейным эфиром (20 мл) и сушат. Полученный бромид трифенилкарбозоксиметилфосфония (около 21,4 г) растворяют при комнатной температуре в воде (300 мл). К водному раствору при интенсивном перемешивании по каплям прибавляют 2 н водный раствор гидроксида натрия (около 25 мл) до pH 10. Выпавшие кристаллы отфильтровывают на воронке Бюхнера, промывают водой и сушат сначала на воздухе, затем в вакуумном эксикаторе над P2O5. Выход — около 15 г (86%) бесцветных кристаллов с т. пл. 122-124 °С (примечание б). Литературные данные: т. пл. 124-126 °С.

#### Лабораторная работа № 5. Этиловый эфир коричной кислоты (реакция Виттига)

Методика синтеза и выделения:

В круглодонную колбу помещают бензальдегид (2,7 г) и этил(трифенилфосфоранилиден)ацетат (10 г) и перемешивают смесь 15 мин. К реакционной смеси прибавляют петролейный эфир (50 мл) и перемешивают смесь 5 мин. Осадок трифенилфосфиноксида отфильтровывают на воронке Бюхнера. Колбу и осадок промывают петролейным эфиром (30 мл). Фильтрат переносят в круглодонную колбу объемом 25—50 мл и упаривают с помощью роторного испарителя. Продукт с помощью пастеровской пипетки переносят в колбу для перегонки в вакууме (примечание 4) и перегоняют в вакууме, собирая фракцию, кипящую при 118-120 °С (17 мм рт. ст.). Выход этилового эфира коричной кислоты — около 3,5 г (85%). Литературные данные: т. кип. 232 °С, 120 °С (17 мм рт. ст.), т. пл. 11-12 °С, nD<sub>20</sub> = 1,5490.

### 5. Учебно-методическое обеспечение и планирование самостоятельной работы обучающихся

Таблица 3

№ Темы	Темы	Виды СРС
1	Специфика, структура и реакционная способность элементоорганических молекул	Чтение обязательной и дополнительной литературы



2	Представления о взаимосвязи между строением и реакционной способностью ЭОС	Чтение обязательной и дополнительной литературы
3	Органические производные элементов I, II и III групп	Чтение обязательной и дополнительной литературы
4	Органические производные элементов IV группы	Чтение обязательной и дополнительной литературы
5	Фосфорорганические соединения (ФОС)	Чтение обязательной и дополнительной литературы
6	Органические производные переходных металлов	Чтение обязательной и дополнительной литературы

## 6. Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю)

### 6.1 Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

Форма проведения промежуточной аттестации – зачет. Аспирант получает зачет по результатам работы в семестре.

Для получения зачета необходимо выполнить лабораторный практикум и запланированные контрольные работы.

При условии, что аспирант набирает за работу не менее 70 баллов, он получает зачет автоматически. В противном случае сдает зачет. Зачёт проводится устно (по билетам) в форме собеседования и/или письменных комментариев к задаче по прилагаемому ниже примерному перечню вопросов.

#### Перечень примерных вопросов для зачета:

1. Область химии ЭОС, ее место в ряду других химических дисциплин. Открытие, применение, значение ЭОС.
2. Типы связей в органических и элементоорганических молекулах.
3. Многоцентровые связи в ЭОС. Правило 18 электронов. Донорно-акцепторное взаимодействие.
4. Проблема связи в ЭОС в свете различия в электроотрицательности элементов; зависимость от положения в группе и периоде.
5. Кратные связи углерод - элемент, элемент - элемент.
6. Особенности химических связей углерод - переходный металл.
7. Электронная и пространственная структура ЭОС как функция положения элемента в Периодической системе.
8. Природа связи металл - лиганд; классификация органических производных переходных металлов.
9. Общая характеристика строения и свойств активных металлоорганических соединений - производных элементов главных подгрупп I и II групп.
10. Природа связи фосфор - углерод. Общая характеристика органических производных фосфора.
11. Электроотрицательность элементов и ее проявление в элементоорганической химии.
12. Сходство и различие характера химической связи в органических и элементоорганических молекулах.
13. Характеристика простой связи углерод-элемент.
14. Активные металлоорганические соединения - общая характеристика.
15. Ртутьорганические соединения.
16. Цинкорганические соединения
17. Магнийорганические соединения



18. Органические производные бора.
19. Аллюминийорганические соединения.
20. Общая характеристика производных элементов III группы. Электронодефицитные молекулы.
21. Общая характеристика производных элементов IV группы.
22. Кремнийорганические соединения.
23. Соединения одно- и двухкоординированного фосфора. Факторы стабильности и общая характеристика реакционной способности.
24. Общая характеристика производных трехкоординированного фосфора, сходство и различие с аналогичными соединениями азота. Бифильность.
25. Полные фосфиты. Реакция Арбузова.
26. Общая характеристика производных четырехкоординированного фосфора.
27. Общая характеристика органических производных переходных металлов.
28.  $\sigma$ -Комплексы переходных металлов. Факторы стабильности, природа связи, химические свойства.
29. Олефин как лиганд в комплексах переходных металлов. Изменения в структуре и свойствах олефина в результате координации.
30. Металлокомплексный катализ и его применение в технологических процессах.

## 6.2 Критерии оценивания компетенций:

Таблица 4

Карта критериев оценивания компетенций

№ п/п	Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенций, соотнесенные с планируемыми результатами обучения	Оценочные материалы	Критерии оценивания
1	ПК-10 - Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности), владением технологией	Знает цели, методы и специфику элементоорганической химии, особенности химических связей и строения элементоорганических соединений. Имеет представление о сходстве и различии этих веществ с органическими и неорганическими аналогами.	Реферат, доклад, устный (или письменный) ответ на зачете. Работа с современной российской и зарубежной литературой по тематике дисциплины. Подготовка презентации по проработанным публикациям. Научный доклад по рассматриваемым темам.	При оценивании выступлений учитывается: подготовка презентации, содержательность доклада, ответы на вопросы, участие в дискуссии по предложенной теме. Компетенция сформирована: при правильности и полноте ответов на теоретические вопросы, при глубине понимания

	мониторинга педагогических нововведений	Умеет применять теоретические знания в учебной и профессиональной, в том числе и научно-исследовательской, деятельности.	Критический анализ литературных источников, предложение путей для более достоверной формы представления результатов и постановке задач для комплексного решения проблемы.	вопроса и правильности выполнения предложенных заданий. Шкала критериев согласно требованиям п.4.29 "Положения о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся ФГАОУ ВО "ТюмГУ".
2	ПК-11 - Способность использовать современную научную аппаратуру и методы физико-химического анализа, используемые при выполнении научных исследований в области органической химии (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, ЯМР, поляриметрия, ЯМР, ЭПР, ИК, КР, УФ-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ)	<p>Знает основное серийное оборудование для каждого рассматриваемого физического и физико-химического метода исследования веществ (элементный анализ, газовая и жидкостная хроматография, УФ-, ИК-, ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия); математические алгоритмы и методы обработки первичных спектроскопических и спектрометрических данных.</p> <p>Умеет выбрать соответственно поставленной задаче исследования тот или иной вид спектроскопии (определить достоинства и недостатки, а также области применения); комбинировать в различных сочетаниях два и более спектральных методов для достижения полного определения структуры исследуемого вещества</p>	<p>Реферат, доклад, презентация, устный (или письменный) ответ на зачете. Работа на современном аналитическом оборудовании.</p> <p>устный (или письменный) ответ на зачете</p>	<p>Компетенция сформирована: при правильности и полноте ответов на теоретические вопросы, при глубине понимания вопроса и правильности выполнения предложенных заданий. Шкала критериев согласно требованиям п.4.29 "Положения о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся ФГАОУ ВО "ТюмГУ".</p>



## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

### 7.1 Основная литература:

1. Биометаллоорганическая химия : учебное пособие / под редакцией Ж. Жауэн ; перевод с английского В. П. Дядченко, К. В. Зайцева. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 505 с. — ISBN 978-5-00101-668-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/151536> (дата обращения: 13.01.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей

2. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия : учебное пособие / К. Эльшенбройх ; перевод с немецкого Ю. Ф. Опруненко, Д. С. Перекалина. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2017. — 749 с. — ISBN 978-5-00101-504-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/94112> (дата обращения: 13.01.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

3. Травень, В. Ф. Практикум по органической химии: Учебное пособие / Травень В.Ф., Щекотихин А.Е., - 2-е изд., (эл.) - Москва :Лаборатория знаний, 2017. - 595 с.: ISBN 978-5-00101-510-9. - Текст: электронный. - URL: <https://new.znanium.com/catalog/product/542519> (дата обращения: 13.01.2020)

### 7.2 Дополнительная литература:

1. Металлоорганическая химия переходных металлов : Основы и применения : в 2 ч / Дж. Колмен, Л. Хигедас, Дж. Нортона, Р. Финке ; Пер. с англ. М. А. Родкина; Под ред. И. П. Белецкой. — Москва : Мир, Б.г. Ч. 2. — 1989. — 396 с. : ил. ; 22 см. 5.20 р.

2. Металлоорганическая химия переходных металлов : Основы и применения : в 2 ч / Дж. Колмен, Л. Хигедас, Дж. Нортона, Р. Финке ; Пер. с англ. М. А. Родкина; Под ред. И. П. Белецкой. — Москва : Мир, Б.г. Ч. 1. — 1989. — 504 с. : ил. ; 22 см. — Предм. указ. : с. 499-502. ISBN 5-03-000279-0 : 5.60 р.

### 7.3 Интернет – ресурсы и периодические издания:

Общий информационный поиск необходимой литературы можно осуществлять на доступных интернет-ресурсах. Портал фундаментального химического образования в России. Наука. Образование. Технологии. [www.chemnet.ru](http://www.chemnet.ru), <http://chemport.ru/>; интернет-лекции по химии элементоорганических соединений - <http://www.scs.uiuc.edu/white/index.php?p=lectures>

История становления химии фосфорорганических соединений - [http://www.pereplet.ru/nauka/Soros/pdf/9607\\_039.pdf](http://www.pereplet.ru/nauka/Soros/pdf/9607_039.pdf)

Классификация фосфорорганических соединений - <http://www.reakor.ru/leos/base/eos09.html>

Химия элементоорганических соединений - <http://www.chem.isu.ru/leos/base/eos01.html>  
элементоорганическая химия: новости химической науки - [http://www.chemport.ru/chemnews.php?tag=elementorganic\\_chemistry](http://www.chemport.ru/chemnews.php?tag=elementorganic_chemistry)

### 7.4. Современные базы данных и информационные справочные системы:

Для поиска необходимой литературы, научных статей и другой информации используются информационные справочные системы, в том числе и Электронно-библиотечные системы (ЭБС), находящиеся в подписке ТюмГУ, например, ЭБС Лань (<https://e.lanbook.com/>), МЭБ (<https://icdlib.nspu.ru/>); НЭБ (<https://rusneb.ru/>); Базы данных, доступные в рамках национальной подписки: *American Chemical Society* (<https://www.acs.org/content/acs/en.html>); *Cambridge University Press* (<https://www.cambridge.org/core>); *Royal Society of Chemistry* (<https://pubs.rsc.org/>); журналы издательства Wiley (<https://onlinelibrary.wiley.com>). Другие базы данных, находящиеся в



свободном доступе в сети Интернет, в частности, ScienceDirect, Wileylibrary, PubChem и Google Scholar, а также базы данных Reaxys и SciFinder.

#### **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю):**

В качестве программного обеспечения дисциплины «Химия элементоорганических соединений» будут весьма полезны пакеты прикладных программ: программный комплекс ACDLabs (ACD/NMR Processor Academic Edition) (академическая версия доступна на сайте производителя [http://www.acdlabs.com/resources/freeware/nmr\\_proc/](http://www.acdlabs.com/resources/freeware/nmr_proc/)) и ChemBioDraw (пробная версия доступна на сайте <http://scistore.cambridgesoft.com/ScistoreSoftwareDisplay.aspx?Trial=Trial/>).

Работа с информационным порталом ИБЦ ТюмГУ.

Использование типовых компьютерных программ (ACD/ChemSketch, Excel, Word, PowerPoint) для решения вычислительных задач, составления отчетов и презентаций.

Платформа для электронного обучения *Microsoft Teams*

#### **9. Технические средства и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

Для чтения лекций необходимо наличие аудиторий, оснащенных мультимедийной техникой (компьютер, проектор и др.).

Для самостоятельной работы студентов необходим доступ в компьютерный класс, имеющий выход в Интернет.

Материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включает в себя: учебные лаборатории органического синтеза (ауд. 106 корп. 5А), (ауд. 102, корп. 5А), (ауд.115, корп. 5А), учебно-научные лаборатории НОЦ «Химическая экспертиза и экологическая безопасность» (ауд. 116 и 117, корп. 5А), лаборатория экологических исследований (ауд. 101, корп. 5А). Лаборатории оснащены необходимыми приборами, в том числе и современным научным оборудованием и приборами (собственное оборудование ЦКП) - газовый хроматограф Trace GC Ultra (Thermo Electron) с масс-селективным детектором DSQ II; Газовый хроматограф с масс-селективным детектором SCION SQ (Bruker); Спектрофлуориметр RF 5301 PC (Shimadzu); Жидкостный хроматограф Agilent 1200 (Agilent Technologies) с тандемным квадрупольным масс-спектрометром с источником ионизации электроспрей и химической ионизацией под атмосферным давлением Applied Biosystems/MDS Sciex API 2000 LC/MS/MS (Applied Biosystems); Аппаратно-программный комплекс «Кристалл 5000.2» на базе газовых хроматографов с системой захлаживания термостата и программой обработки «Хроматэк\_ДНА» (Хроматэк); Абсорбционный спектрофотометр УФ- и видимой области Agilent 8453 (Agilent Technologies); Жидкостной хроматограф с диодно-матричным детектором Agilent 1100 (Agilent Technologies); ИК-Фурье спектрометр Agilent Cary 630 FTIR; Двухлучевой УФ-, ВИД-спектрофотометр Shimadzu UV-2600; Хроматомасс-спектрометр Agilent 5977B GC/MSD с многофункциональной системой для пиролитической хроматографии EGA/PY-3030D (Frontier, Япония); Система жидкостной хроматографии Agilent 1260 Infinity II с времяпролетным масс-спектрометром высокого разрешения Agilent 6545B Q-TOF).



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



УТВЕРЖДАЮ  
Директор института химии  
*Т.А. Кремлева* /Т.А. Кремлева/  
2 марта 2020 г.

**НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ**

Рабочая программа

для обучающихся по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки  
профиль (направленность) программы: Органическая химия  
очная форма обучения <sup>1</sup>

<sup>1</sup> РПД может быть сформирована как единый документ по двум более формам обучения

Кулаков И.В. Научно-исследовательская деятельность. Рабочая программа для обучающихся по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, профиль (направленность) программы: Органическая химия, форма обучения очная. Тюмень, 2020.

Рабочая программа дисциплины (модуля) опубликована на сайте ТюмГУ: Научно-исследовательская деятельность [электронный ресурс] / Режим доступа: <https://www.utmn.ru/sveden/education/#>.



### **Пояснительная записка**

**Целью научно-исследовательской деятельности** является:

приобретение опыта научного исследования, освоение экспериментальных методов анализа различных объектов, исследуемых в органической химии, практическое использование теоретических знаний в решении практических задач исследования и производства.

#### **Задачи НИД:**

- формирование комплексного представления о специфике деятельности научного работника по направлению подготовки "Химические науки" (уровень подготовки кадров высшей квалификации);
- овладение методами исследования органической химии, освоение методологии решения практических профессиональных задач;
- совершенствование умений и навыков самостоятельной научно-исследовательской деятельности аспиранта;
- участие аспиранта в научно-исследовательской работе, проводимой кафедрой;
- внесение аспирантом личного вклада в научно-исследовательскую программу, осуществляемую кафедрой;
- сбор материала для научно-квалификационной деятельности (диссертации);
- приобретение практических навыков в поиске и использовании источников научных знаний по химии (периодические издания, реферативные журналы, библиографические обзоры, монографии, справочники, электронные и наукометрические базы данных);
- подготовка тезисов докладов на конференции или статьи для опубликования в рецензируемых журналах баз WoS и Scopus, рекомендованных и учитываемых ВАК РФ при защите диссертации;
- получение навыков преподавания специальных дисциплин на кафедре;
- закрепление знаний, умений и навыков, полученных аспирантами в процессе изучения дисциплин аспирантской программы;
- развитие у аспирантов личностных качеств, определяемых общими целями обучения и воспитания, изложенными в ОП.

### **1.1. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Данная дисциплина входит в БЗ Блок 3 «Научные исследования» (вариативная часть).

Дисциплина «Научно-исследовательская деятельность» осваивается с 1 по 6 семестр включительно. Блок 3, в который входит данная дисциплина, базируется на базовой части Блока 1 «Дисциплины (модули)»; на наборе дисциплин (модулей) вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)», которые определяются в соответствии с направленностью программы аспирантуры.

Компетенции, формируемые в процессе научно-исследовательской деятельности необходимы для подготовки научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук. Дисциплина «Научно-исследовательская деятельность» логически и содержательно-методически связана с дисциплиной «Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук», входящей в БЗ Блок 3 «Научные исследования», а также с дисциплиной «Представление научного доклада об основных результатах подготовленной научно квалификационной работы (диссертации)», входящей в Б4 Блок 4 «Государственная итоговая аттестация».

### **1.2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения данной дисциплины (модуля)**

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения: (знаниевые/функциональные)
УК-1 - Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Знает основные методы научно-исследовательской деятельности.
	Умеет выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать поступающую информацию.
УК-5 - Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития	Знает цели, задачи, основные разделы, объекты и методы аналитической химии; соответствие выбранной тематики исследования паспорту направления (специальности); методы достижения поставленной цели при выполнении научного исследования, вопросы организации планирования и финансирования научных работ, требования к оформлению научно-технической документации, порядок оформления заявок на грантовую поддержку научного исследования.
	Умеет обосновать целесообразность разработки темы: составить план исследований на ближайшую и отдаленную перспективу, подобрать необходимые источники по теме (литературу, патентные материалы, научные отчеты, техническую документацию и др.); провести их анализ систематизацию и обобщение. Умеет самостоятельно получать экспериментальные данные по выбранной тематике исследования, критически анализировать полученную информацию и представлять результаты собственных научных исследований.
ОПК-2 - Готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	Знает отечественные и зарубежные данные по исследованию объектов – аналогов с целью оценки научной и практической значимости, оборудование, аппаратуру и установки, методы и способы организации коллективной работы по проекту в области химии и смежных наук, необходимые для проведения НИД.
	Умеет выявлять, обосновывать и организовывать необходимость проведения коллективной работы над проектом, привлекать студентов к его выполнению, сотрудничать со специалистами смежных направлений.
ПК-12 - Способность грамотно	Знает основные методы представления и



представлять результаты научных исследований (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация) в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами, осуществлять преподавательскую деятельность по химическим и смежным дисциплинам	оформления результатов проведенных научных исследований, содержание и структуру научных статей, обзоров, докладов, презентаций, научных отчетов, кандидатской диссертации в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами; знает взаимосвязь органической химии с другими науками, методики преподавания химии
	Умеет применять полученные знания и опыт в оформлении научно-исследовательских результатов (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация), преподавании химических дисциплин.

## 2. Структура и объем дисциплины

Таблица 1

Вид учебной работы		Всего часов	Часов в семестре					
			1	2	3	4	5	6
<b>Общий объем</b>	зач. ед.	144	32	19	29	14	30	20
	час	5184	1152	684	1044	504	1080	720
Из них:								
<b>Часы аудиторной работы (всего):</b>		0	0	0	0	0	0	0
Лекции		0	0	0	0	0	0	0
Практические занятия		0	0	0	0	0	0	0
Лабораторные / практические занятия по подгруппам		0	0	0	0	0	0	0
<b>Часы внеаудиторной работы, включая самостоятельную работу обучающегося</b>		5184	1152	684	1044	504	1080	720
Вид промежуточной аттестации (зачет, диф. зачет, экзамен)			Дифференциальный зачет	Дифференциальный зачет	Дифференциальный зачет	Дифференциальный зачет	Дифференциальный зачет	Дифференциальный зачет

## 3. Система оценивания

**3.1.** Научно-исследовательская деятельность осуществляется в форме индивидуальной самостоятельной работы аспиранта под руководством научного руководителя.

Оценивание текущей успеваемости осуществляется по представлению результатов реализации научно-исследовательской деятельности.

1. Составление и реализация плана научно-исследовательской деятельности.

2. Составление библиографического списка.
3. Доклад на научном семинаре или конференции по теме исследования.
4. Подготовка статьи по итогам доклада на научном семинаре или конференции.
5. Подготовка отчета о выполненной работе в соответствии с установленной формой отчетности.

Формой промежуточной аттестации является составление и защита отчета по НИД в рамках дифференцированного зачета. Результаты этой деятельности рассматриваются на заседаниях кафедры 2 раза в год: в период полугодовой и итоговой (за год) аттестации аспирантов. Результаты годовых аттестаций утверждаются на заседаниях Ученого совета института.

Научный руководитель ставит дифференцированную оценку (зачет) по итогам научно-исследовательской деятельности аспиранта. Аспирант аттестуется с оценкой «удовлетворительно», «хорошо» или «отлично».

«Отлично» – аспирант в полном объеме реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, результаты научно-исследовательской деятельности характеризуются достоверностью, не содержат фактических ошибок, логичностью, системностью; аспирант подготовил отчет о проделанной работе.

«Хорошо» – аспирант в целом реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, однако в результатах есть некоторые пробелы, отсутствует системность; аспирант подготовил отчет о проделанной работе.

«Удовлетворительно» – аспирант частично реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, в результатах отсутствует системность, некоторые выводы недостоверны, содержат фактические ошибки; аспирант несвоевременно подготовил отчет о проделанной работе.

«Неудовлетворительно» – аспирант не реализовал план научно-исследовательской работы на конкретном этапе; отчет не подготовлен.

Оценка по НИД в каждом семестре приравнивается к оценкам по теоретическому обучению и учитывается при подведении итогов общей успеваемости аспиранта. Аспиранты, не выполнившие программу по НИД, либо получившие неудовлетворительную оценку, могут быть не аттестованы.

#### 4. Содержание дисциплины

##### 4.1. Тематический план дисциплины

Таблица 2

№ п/п	Наименование тем и/или разделов	Объем дисциплины (модуля), час.				
		Всего	Виды аудиторной работы (академические часы)			Иные виды контактной работы
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные/практические занятия по подгруппам	
1	2	3	4	5	6	7
1 семестр						
	Организационный этап	1122	0	0	0	



	научно-исследовательской деятельности					
	Консультации с научным руководителем	28	0	0	0	28
	Диф.зачет.	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	<b>1152</b>	0	0	0	30
2 семестр						
	Подготовительный этап научно-исследовательской деятельности	660	0	0	0	
	Консультации с научным руководителем	22	0	0	0	22
	Диф.зачет.	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	<b>684</b>	0	0	0	24
3 семестр						
	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	1014	0	0	0	
	Консультации с научным руководителем	28	0	0	0	28
	Диф.зачет.	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	<b>1044</b>	0	0	0	30
4 семестр						
	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	480	0	0	0	
	Консультации	22	0	0	0	22

	и с научным руководителем					
	Диф.зачет.	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	<b>504</b>	0	0	0	24
5 семестр						
	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	1050	0	0	0	
	Консультации и с научным руководителем	28	0	0	0	28
	Диф.зачет.	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	<b>1080</b>	0	0	0	30
6 семестр						
	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	696	0	0	0	
	Консультации и с научным руководителем	22	0	0	0	22
	Диф.зачет.	2	0	0	0	2
	Итого (часов)	<b>720</b>	0	0	0	24

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля) по темам

Научно-исследовательская деятельность осуществляется в форме индивидуальной самостоятельной работы аспиранта под руководством научного руководителя, содержание данной дисциплины формируют следующие темы: «Организационный этап научно-исследовательской деятельности», «Подготовительный этап научно-исследовательской деятельности», «Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности».

#### 5. Учебно-методическое обеспечение и планирование самостоятельной работы обучающихся



№ темы	Темы	Формы СРС, включая требования к подготовке к занятиям
1.	Организационный этап научно-исследовательской деятельности	<p>Определение направления научного исследования, выбор темы, определение объекта и предмета исследования;</p> <p>Планирование научно-исследовательской деятельности аспиранта;</p> <p>Изучение теоретического материала, ознакомление с тематикой исследовательских работ в данной области, обоснование актуальности темы исследования и ее теоретической значимости;</p> <p>Постановка целей и задач исследования;</p> <p>Подготовка отчета о научно-исследовательской деятельности.</p>
2.	Подготовительный этап научно-исследовательской деятельности	<p>Определение степени разработанности изучаемой проблемы;</p> <p>Деятельность с источниками научной информации по теме диссертации;</p> <p>Разработка программы и инструментария собственного исследования;</p> <p>Изучение методик анализа объектов исследования;</p> <p>Актуализация проблематики исследования с учетом выявления его новизны;</p> <p>Выступление на конференции, подготовка тезисов доклада;</p> <p>Подготовка отчета о научно-исследовательской деятельности (годовой отчет).</p>
3.	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	<p>Планирование научно-исследовательской деятельности 3-го семестра ;</p> <p>Работа с источниками научной информации, анализ основных результатов и положений, полученных ведущими специалистами в области проводимого исследования, оценка их применимости в рамках исследования;</p> <p>Составление библиографического списка по теме;</p> <p>Изучения методик анализа объектов исследования, выбор наиболее оптимальных методик для выполнения НИД;</p> <p>Выполнения поставленных экспериментальных задач на 3-й семестр по тематике исследования. Апробация выбранных методик синтеза и анализа объектов, их доработка и усовершенствование;</p> <p>Выступление на конференции, подготовка тезисов доклада;</p> <p>Подготовка отчета о научно-исследовательской деятельности.</p>

4.	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	Планирование научно-исследовательской деятельности 4-го семестра; Разработка основных направлений экспериментального исследования по теме диссертации; Выполнение НИД; Представление и конкретизация основных результатов исследования; Анализ, оценка и интерпретация результатов исследования; Подготовка статьи для научного издания; Подготовка отчета о научно-исследовательской деятельности (годовой отчет).
5.	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	Планирование научно-исследовательской деятельности 5-го семестра; Выполнение НИД; Оформление результатов НИД; Анализ, оценка и интерпретация результатов исследования; Оценка достоверности и достаточности данных исследования; Подготовка статьи для научного издания; Подготовка отчета о научно-исследовательской деятельности.
6.	Исследовательский этап научно-исследовательской деятельности	Планирование научно-исследовательской деятельности 6-го семестра; Выполнение НИД; Оценка достоверности и достаточности данных исследования; Оценка практической значимости будущей диссертации; Оценка предполагаемого личного вклада автора в разработку темы Оценка предполагаемого личного вклада автора в разработку темы; Представление и конкретизация основных результатов исследования; Подготовка статьи для научного издания; Подготовка отчета о научно-исследовательской деятельности (годовой отчет).

**Изучение теоретического материала** включает чтение и анализ обязательной и дополнительной литературы, предусмотренной рабочей программой дисциплины, которая конкретизирует для аспиранта содержание основных этапов исследования; а также, по согласованию с научным руководителем, чтение и анализ той литературы, которая позволит аспиранту более глубоко и всесторонне познакомиться с исследуемой проблематикой. Контроль – конспект источников, собеседование.

**Научная статья** представляет собой публикацию, являющуюся логически завершенным исследованием проблемы на определенном этапе. Является обязательным критерием, которому должны отвечать диссертации на соискание ученой степени кандидата наук: основные научные результаты диссертации должны быть опубликованы в рецензируемых научных изданиях. Контроль – публикация статьи в научном издании.

**Выступление на конференции** предполагает участие аспиранта в научных конференциях различного уровня, с последующей публикацией тезисов доклада, либо статьи по мотивам выступления на конференции в научном издании.

**6. Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю)**



## 6.1 Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

Формой промежуточной аттестации является составление и защита отчета по НИД в рамках дифференцированного зачета.

Результаты научно-исследовательской деятельности рассматриваются на заседаниях кафедры 2 раза в год: в период полугодовой и итоговой (за год) аттестации аспирантов. Результаты годовых аттестаций утверждаются на заседаниях Ученого совета институтов. Научный руководитель ставит дифференцированную оценку (зачет) по итогам научно-исследовательской работы аспиранта. Оценка по НИД в каждом семестре приравнивается к оценкам по теоретическому обучению и учитывается при подведении итогов общей успеваемости аспиранта. Аспиранты, не выполнившие программу по НИД или выполнившие не в полном объеме, получают неудовлетворительную оценку.

## 6.2 Критерии оценивания компетенций:

Таблица 4

Карта критериев оценивания компетенций

№ п/п	Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенций, соотнесенные с планируемыми результатами обучения	Оценочные материалы	Критерии оценивания
1.	УК-1 - Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Знает основные методы научно-исследовательской деятельности.  Умеет выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать поступающую информацию.	Индивидуальный план аспиранта. Тема и план диссертации. Отчет о НИД, доклад на заседании кафедры. Тезисы докладов, статьи.	При оценивании выступлений учитывается: подготовка презентации, содержательность доклада, ответы на вопросы по теме презентации, участвовать в дискуссии по предложенной теме. Компетенция сформирована: при правильности и полноте ответов на теоретические вопросы, при глубине понимания вопроса и правильности выполнения предложенных заданий.
2.	УК-5 - Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития	Знает цели, задачи, основные разделы, объекты и методы аналитической химии; соответствие выбранной тематики исследования паспорту направления (специальности); методы достижения поставленной цели при выполнении научного исследования, вопросы организации планирования и финансирования научных работ, требования к оформлению научно-технической документации, порядок оформления заявок на грантовую поддержку научного исследования.	Индивидуальный план аспиранта. Отчет о НИД, доклад на заседании кафедры. Написание статей и тезисов докладов.	Шкала критериев согласно требованиям п.4.29 "Положения о текущем контроле успеваемости и промежуточной

		<p>Умеет обосновать целесообразность разработки темы: составить план исследований на ближайшую и отдаленную перспективу, подобрать необходимые источники по теме (литературу, патентные материалы, научные отчеты, техническую документацию и др.); провести их анализ систематизацию и обобщение. Умеет самостоятельно получать экспериментальные данные по выбранной тематике исследования, критически анализировать полученную информацию и представлять результаты собственных научных исследований.</p>		<p>аттестации обучающихся ФГАОУ ВО "ТюмГУ". «Отлично» – аспирант в полном объеме реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, результаты научно-исследовательской деятельности характеризуются достоверностью, не содержат фактических ошибок, логичностью, системностью; аспирант подготовил отчет о проделанной работе. «Хорошо» – аспирант в целом реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, однако в результатах есть некоторые пробелы, отсутствует системность; аспирант подготовил отчет о проделанной работе. «Удовлетворительно» – аспирант частично реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, в результатах отсутствует системность, некоторые выводы</p>
3.	ОПК-2 - Готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	<p>Знает отечественные и зарубежные данные по исследованию объектов – аналогов с целью оценки научной и практической значимости, оборудование, аппаратуру и установки, методы и способы организации коллективной работы по проекту в области химии и смежных наук, необходимые для проведения НИД.</p> <p>Умеет выявлять, обосновывать и организовывать необходимость проведения коллективной работы над проектом, привлекать студентов к его выполнению, сотрудничать со специалистами смежных направлений.</p>	Соруководство исследовательской работой бакалавров, магистров, курсовиков.	<p>подготовил отчет о проделанной работе. «Удовлетворительно» – аспирант частично реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, в результатах отсутствует системность, некоторые выводы</p>
4.	ПК-12 - Способность грамотно представлять результаты научных исследований (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация) в соответствии с принятыми в области	<p>Знает основные методы представления и оформления результатов проведенных научных исследований, содержание и структуру научных статей, обзоров, докладов, презентаций, научных отчетов, кандидатской диссертации в соответствии с принятыми в области органической химии нормами и правилами; знает взаимосвязь органической химии с другими науками, методики преподавания химии</p> <p>Умеет применять полученные</p>	Работа с современной российской и зарубежной литературой по тематике дисциплины. Подготовка презентации по проработанным публикациям. Доклад по рассматриваемым темам. Критический анализ	<p>подготовил отчет о проделанной работе. «Удовлетворительно» – аспирант частично реализовал план научно-исследовательской деятельности на конкретном этапе, в результатах отсутствует системность, некоторые выводы</p>



	органической химии нормами и правилами, осуществлять преподавательскую деятельность по химическим и смежным дисциплинам	знания и опыт в оформлении научно-исследовательских результатов (научные статьи и обзоры, доклады, презентации, научные отчеты, кандидатская диссертация), преподавании химических дисциплин.	литературных источников, предложение путей для более достоверной формы представления результатов и постановка задач для комплексного решения проблемы. Подготовка тезисов докладов, статей.	недостоверны, содержат фактические ошибки; аспирант несвоевременно подготовил отчет о проделанной работе. «Неудовлетворительно» – аспирант не реализовал план научно-исследовательской работы на конкретном этапе; отчет не подготовлен.
--	---	---	---	--

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

### 7.1 Основная литература:

1. Данилова, И. И. Введение в проектную и научно-исследовательскую деятельность: учебное пособие / И. И. Данилова, Ю. В. Привалова. – Введение в проектную и научно-исследовательскую деятельность. – Ростов-на-Дону, Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2019 – 106 с. «IPR BOOKS». Режим доступа: URL: <http://www.iprbookshop.ru/95771.html> (дата обращения: 28.02.2020).
2. Шкляр, М. Ф. Основы научных исследований. – 5. – Москва: Издательско-торговая корпорация "Дашков и К", 2013 – 244 с. – Электронно-библиотечная система «Znanium.com» Режим доступа: URL: <http://znanium.com/go.php?id=415019> (дата обращения: 28.02.2020).
3. Володкина, Ольга Александровна. Библиографический список и библиографическая ссылка к научной работе. Как это делается: методическое руководство по оформлению диссертаций, курсовых и дипломных работ / О. А. Володкина. — Тюмень, 2017: ил. — Свободный доступ из сети Интернет (чтение). — <URL: [https://library.utmn.ru/dl/bibliogr\\_materiali/Пособие по БО\\_О.А.Володкина.pdf](https://library.utmn.ru/dl/bibliogr_materiali/Пособие по БО_О.А.Володкина.pdf)>.

### 7.2 Дополнительная литература:

1. Шестак, Н. В. Научно-исследовательская деятельность в вузе (Основные понятия, этапы, требования) / Н. В. Шестак, Е. В. Чмыхова. – Москва : Современная гуманитарная академия, 2007. – 179 с. – Электронно-библиотечная система «IPR BOOKS» Режим доступа: URL: <http://www.iprbookshop.ru/16935.html> (дата обращения: 28.02.2020).
2. Рекомендации по написанию и оформлению курсовой работы, выпускной квалификационной работы и магистерской диссертации : учебно-методическое пособие/ Е.В. Зудина [и др.]. – Волгоград: Волгоградский государственный социально-педагогический университет, 2016. – 57 с. – Электронно-библиотечная система «IPRbooks» – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/57785.html>. (дата обращения: 28.02.2020).
3. Халин, С. М. Научное исследование: Структура. Функции. Виды. Требования: монография / С. М. Халин. – Тюмень: Тюменский государственный университет, 2020

– 103 с. Режим доступа: RL:[https://library.utmn.ru/dl/PPS/Khalin\\_895\\_2020.pdf](https://library.utmn.ru/dl/PPS/Khalin_895_2020.pdf) (дата обращения: 28.02.2020).

### 7.3 Интернет-ресурсы:

<http://e-library.ru>  
<http://e.lanbook.com>  
<http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html>  
<http://chemport.ru/>  
<http://www.anchem.ru>  
<http://knigozilla.ru/9266-analiticheskaja-khimija..html>  
<http://www.nofollow.ru/detail106408.htm>  
[http://techbiblio.ru/index.php?option=com\\_content&task=blogcategory&id=149&Itemid=310](http://techbiblio.ru/index.php?option=com_content&task=blogcategory&id=149&Itemid=310)  
<http://nehudlit.ru/books/detail7514.html>  
[http://web-local.rudn.ru/web-local/disc/disc\\_4328/](http://web-local.rudn.ru/web-local/disc/disc_4328/)  
<http://archive.neicon.ru/xmlui/> Архив научных журналов

### 7.4. Современные базы данных и информационные справочные системы:

Для поиска необходимой литературы, научных статей и другой информации используются информационные справочные системы, в том числе и Электронно-библиотечные системы (ЭБС), находящиеся в подписке ТюмГУ, например, ЭБС Лань (<https://e.lanbook.com/>), МЭБ (<https://icdlib.nspu.ru/>); НЭБ (<https://rusneb.ru/>); Базы данных, доступные в рамках национальной подписки: *American Chemical Society* (<https://www.acs.org/content/acs/en.html>); *Cambridge University Press* (<https://www.cambridge.org/core>); *Royal Society of Chemistry* (<https://pubs.rsc.org/>); журналы издательства Wiley (<https://onlinelibrary.wiley.com>). Другие базы данных, находящиеся в свободном доступе в сети Интернет, в частности, ScienceDirect, Wileylibrary, PubChem и Google Scholar, а также базы данных Reaxys и SciFinder.

### 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости):

#### Лицензионное ПО:

– Платформа для электронного обучения Microsoft Teams:

#### Свободно распространяемое ПО, в том числе отечественного производства:

Использование типовых компьютерных программ (Excel, Word, PowerPoint) для решения вычислительных задач, составления отчетов и презентаций.

### 9. Технические средства и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Все лекции и семинарские занятия обеспечены мультимедийными презентациями и видеофильмами. Для чтения лекций и проведения семинарских занятий имеются аудитории, оснащенные мультимедийной техникой (компьютер, проектор и др.).

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ТюмГУ.

Исследования проводятся на базе лабораторий органического синтеза Института химии и ЦКП ТюмГУ (ауд. 106 корп. 5А, ауд. 102 корп. 5А, ауд.115 корп. 5А). Материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включает в себя: Лаборатории оснащены необходимыми приборами (электронные весы, магнитные мешалки, плитки, колбогревы, роторные испарители и др.), в том числе и современным научным оборудованием и приборами (собственное оборудование ЦКП) - газовый хроматограф Trace GC Ultra (Thermo Electron) с масс-селективным детектором



DSQ II; Газовый хроматограф с масс-селективным детектором SCIION SQ (Bruker); Спектрофлуориметр RF 5301 PC (Shimadzu); Жидкостный хроматограф Agilent 1200 (Agilent Technologies) с тандемным квадрупольным масс-спектрометром с источником ионизации электроспрей и химической ионизацией под атмосферным давлением Applied Biosystems/MDS Sciex API 2000 LC/MS/MS (Applied Biosystems); Аппаратно-программный комплекс «Кристалл 5000.2» на базе газовых хроматографов с системой захлаживания термостата и программой обработки «Хроматэк\_ДНА» (Хроматэк); Абсорбционный спектрофотометр УФ- и видимой области Agilent 8453 (Agilent Technologies); Жидкостной хроматограф с диодно-матричным детектором Agilent 1100 (Agilent Technologies); ИК-Фурье спектрометр Agilent Cary 630 FTIR; Двухлучевой УФ-, ВИД-спектрофотометр Shimadzu UV-2600; Хроматомасс-спектрометр Agilent 5977B GC/MSD с многофункциональной системой для пиролитической хроматографии EGA/PY-3030D (Frontier, Япония); Система жидкостной хроматографии Agilent 1260 Infinity II с времяпролетным масс-спектрометром высокого разрешения Agilent 6545B Q-TOF).

Оснащенность лабораторных помещений и условия работы в них обучающихся должны соответствовать требованиям техники безопасности по работе с химическими реактивами.