

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
органической химии



Х.С. Шихалиев
01.07.2021 г

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.01.01 Современные направления применения ЯМР-
спектроскопии в органической химии

Код и наименование дисциплины в соответствии с Учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.06.01 – Химические науки

2. Профиль подготовки/специализация:

02.00.03 - Органическая Химия

3. Квалификация (степень) выпускника: исследователь, преподаватель-исследователь

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: 1003 – органическая химия

6. Составители программы: д.х.н., проф. Шихалиев Х.С., д.х.н., доц. Крысин М.Ю.,

7. Рекомендована:

НМС химического факультета протокол № 5 от 17.06.2021 г.

8. Учебный год: 2023/2024

Семестр(ы): 6

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целью изучения курса является получение аспирантами, обучающихся по специальности 02.00.03 – органическая химия, представления о методах ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР, техники получения спектров и установления структуры соединений.

Достижение этой цели предусматривает выполнение ряда задач:

- овладение аспирантом способов и приемов установления структуры органических соединений с использованием одно- и двумерных спектров ЯМР;
- овладение приемами установления структуры с использованием масс-спектрометрии, ИК- и УФ-спектроскопии как дополнительных методов к ЯМР-спектроскопии;
- освоение методов интерпретации спектров ЯМР.

Также целями освоения дисциплины «Современные направления применения ЯМР-спектроскопии в органической химии» является формирование общепрофессиональных, универсальных и профессиональных компетенций в соответствии с требованиями ФГОС ВПО по данной направленности подготовки.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: (цикл, к которому относится дисциплина, требования к входным знаниям, умениям и компетенциям, дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей)

Дисциплина по выбору вариативной части.

11. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины:

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
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	Знать: типы информационных химических ресурсов, особенности структурной химической информации, методы поиска научной химической информации, формы представления научной и технической информации Уметь: осознанно использовать структурные данные (в т.ч. банки данных) в химическом исследовании, пользоваться справочной литературой и привлекать материалы из сети Internet для решения профессиональных задач Владеть: приемами планирования и организации работ по решению конкретных задач профессиональной деятельности
УК-4	готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке	Знать: риторические аспекты устной и письменной коммуникации на русском языке. Иметь представление о качествах хорошей речи и приемах речевого воздействия на русском языке. Уметь: использовать систему современных методов и технологий научной коммуникации, в том числе информационных, на русском и иностранном языке. Владеть: навыками создания на русском языке точной, логичной, ясной, выразительной, уместной речи и продуцирования текстов различных жанров научного и официально-делового стилей. Владеть иностранным языком на уровне В 2.
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	знать: основные определения, понятия и термины, используемые в работе со спектральными методами анализа, принципы ядерного эффекта Оверхаузера. уметь: применять результаты корреляционной 2D – гомо- и гетероядерной ЯМР-спектроскопии для доказательства строения регио- и стереоизомеров владеть: основными теориями, механизмами и моделями, описывающими строение органических соединений; методологией выбора спектральных методов доказательства структуры органических соединений
ПК-6	способностью производить квантово-химические расчеты и использовать их данные в	знать: основные принципы квантово-химических расчетов для органических молекул. уметь: сопоставлять данные квантово-химических расчетов и

	исследованиях	данные ЯМР-спектроскопии для доказательства структуры органических соединений. Владеть: навыками доказательства структуры синтезированных соединений по спектрам ЯМР и квантово-химическим расчетам
ПК-9	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области органической химии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	знать: основы физико-химических методов исследования структуры органических соединений, в том числе методов ЯМР-спектроскопии. уметь: интерпретировать данные ЯМР-спектроскопии для установления структуры органических соединений. владеть: навыками расшифровки и интерпретации ЯМР-спектров

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 2 /72.

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) зачет.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)				
	Всего	В том числе в интерактивной форме	По семестрам		
			№ 6	№ сем.
Аудиторные занятия	4		4		
в том числе: Индивидуальные занятия	4		4		
Самостоятельная работа	68		68		
Контроль	-		-		
Итого:	72		72		

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1	Основные представления о ЯМР-спектроскопии	Практика использования спектроскопии ЯМР для решения химических проблем. Методики обработки одномерных и двумерных спектров ЯМР. Решение методом ЯМР типичных задач органической химии.	Современные направления применения ЯМР-спектроскопии в органической химии, https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=8401
2	Ядерный эффект Оверхаузера	Природа, практические следствия, гомо- и гетероядерный эффект, техника измерения, разностные спектры, требования к образцам.	
3	2D – гомо- и гетероядерная ЯМР-спектроскопия	Методики гомоядерной и гетероядерной корреляционной спектроскопии для доказательства структуры органических соединений.	

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		ИЗ	Практические	Контроль	Самостоятельная работа	
1	Основные представления о ЯМР-спектроскопии	1			22	23
2	Ядерный эффект Оверхаузера	1			22	23
3	2D – гомо- и гетероядерная ЯМР-спектроскопия	2			24	26
Итого:		4			68	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Работа с конспектами лекций, презентационным материалом, индивидуальные занятия. При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (*Современные направления применения ЯМР-спектроскопии в органической химии*, <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=8401>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

(список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков / Ю.М. Воловенко, [и др.] .— М. : ICSPF PRESS, 2011 .— 694 с.
2	Блюмих Б. Основы ЯМР / Б. Блюмих ; пер. с англ. Н.Е. Агаповой .— М. : Техносфера, 2007 .— 152 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	Преч Э. Определение строения органических соединений / Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффельтер ; пер. с англ. Б.Н. Тарасевича .— М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006 .— 439 с.
2	Жунке А. Ядерный магнитный резонанс в органической химии / А. Жунке ; Пер. с нем. О.С. Чижова, Ю.С. Шабарова .— М. : Мир, 1974 .— 176 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
1	Библиотеки, в том числе цифровые (электронные) библиотеки, обеспечивающие доступ к профессиональным базам данных, информационным справочным и поисковым системам, а также иным информационным ресурсам: ЭБС «Издательства «Лань» ЭБС «Консультант студента» ЭБС «Электронная библиотека технического вуза», комплект «Медицина. Здоровоохранение (ВПО)» ЭБС «Университетская библиотека online» Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ» Электронная библиотека ЗНБ ВГУ База данных РЖ ВИНТИ Научная электронная библиотека eLibrary.ru.ru Полнотекстовые БД зарубежных и российских научных журналов (https://lib.vsu.ru/ Электронные каталоги/Поиск полнотекстовых БД)

2	Современные направления применения ЯМР-спектроскопии в органической химии, https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=8401
---	--

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

Рекомендуется индивидуально, в зависимости от темы научной работы.

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

При реализации дисциплины проводятся индивидуальные консультации. Для самостоятельной работы рекомендуется список литературы. При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ), позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=8401>, Курс «Современные направления применения ЯМР-спектроскопии в органической химии,»), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины также рекомендуются ресурсы для электронного обучения (п. 15)

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Мультимедийная техника: ноутбук, мультимедийный проектор, экран

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
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	Знать: типы информационных химических ресурсов, особенности структурной химической информации, методы поиска научной химической информации, формы представления научной и технической информации	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	Уметь: осознанно использовать структурные данные (в т.ч. банки данных) в химическом исследовании, пользоваться справочной литературой и привлекать материалы из сети Internet для решения профессиональных задач	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	Владеть: приемами планирования и организации работ по решению	Темы 1-3	Вопросы к зачету

	конкретных задач профессиональной деятельности		
УК-4 Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке	Знать: риторические аспекты устной и письменной коммуникации на русском языке. Иметь представление о качествах хорошей речи и приемах речевого воздействия на русском языке	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	Уметь: использовать систему современных методов и технологий научной коммуникации, в том числе информационных, на русском и иностранном языке	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	Владеть: навыками создания на русском языке точной, логичной, ясной, выразительной, уместной речи и продуцирования текстов различных жанров научного и официально-делового стилей. Владеть иностранным языком на уровне В 2.	Темы 1-3	Вопросы к зачету
ОПК-1 Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	знать: основные определения, понятия и термины, используемые в работе со спектральными методами анализа, принципы ядерного эффекта Оверхаузера.	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	уметь: применять результаты корреляционной 2D – гомо- и гетероядерной ЯМР-спектроскопии для доказательства строения регио- и стереоизомеров	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	владеть: основными теориями, механизмами и моделями, описывающими строение органических соединений; методологией выбора спектральных методов доказательства структуры органических соединений	Темы 1-3	Вопросы к зачету
ПК-6 способность производить квантово-химические расчеты и использовать их данные в исследованиях	знать: основные принципы квантово-химических расчетов для органических молекул	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	уметь: сопоставлять данные квантово-химических расчетов и данные ЯМР-спектроскопии для доказательства структуры органических соединений.	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	Владеть: навыками доказательства структуры синтезированных соединений по спектрам ЯМР и квантово-химическим расчетам	Темы 1-3	Вопросы к зачету
ПК-9 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области органической химии с использованием современных методов исследования и информационно-	знать: основы физико-химических методов исследования структуры органических соединений, в том числе методов ЯМР-спектроскопии.	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	уметь: интерпретировать данные ЯМР-спектроскопии для установления структуры органических соединений	Темы 1-3	Вопросы к зачету
	Владеть: навыками расшифровки и интерпретации ЯМР-спектров	Темы 1-3	Вопросы к зачету

коммуникационных технологий			
-----------------------------	--	--	--

* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели (ЗУНы из 19.1):

- 1) знание учебного материала и владение понятийным аппаратом спектральных методов в органической химии;
- 2) умение связывать теорию с практикой на основе экспериментальных результатов, полученных при анализе данных ЯМР-спектроскопии;
- 3) умение иллюстрировать ответ примерами, экспериментальными данными;
- 4) умение определять структуру органических соединений по комплексу данных ЯМР-спектроскопии;
- 5) владение основными методами определения строения спектральными методами.

Для оценивания результатов обучения на зачете используется 2-балльная шкала: «зачтено», «не зачтено».

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Полное соответствие ответа обучающегося всем перечисленным критериям. Продемонстрировано знание основных спектральных методов, используемых в органической химии для определения строения органических соединений, умение выбрать правильными методы ЯМР-спектроскопии для точного доказательства структуры органических соединений. Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом, способен иллюстрировать ответ примерами, экспериментальными данными.	<i>Повышенный уровень</i>	<i>Зачтено</i>
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному (двум) из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Недостаточно продемонстрировано знание метода ЯМР-спектроскопии.	<i>Базовый уровень</i>	<i>Зачтено</i>
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым двум (трем) из перечисленных показателей, обучающийся дает неполные ответы на дополнительные вопросы. Демонстрирует частичные знания методов ЯМР-спектроскопии.	<i>Пороговый уровень</i>	<i>Зачтено</i>
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем(четырем) из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания методов ЯМР-спектроскопии.	–	<i>Не зачтено</i>

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

1. Магнитные моменты атомных ядер. Расщепление уровней энергии ядра во внешнем магнитном поле. Условие ЯМР. Релаксация. Общие принципы устройства современных импульсных спектрометров ЯМР.
2. Химические сдвиги и константы спин-спинового взаимодействия в спектрах ЯМР-¹H и ЯМР-¹³C органических соединений. Связь этих параметров со строением молекул.
3. Правила интерпретации спектров ЯМР первого порядка
4. Определение структуры органических соединений методом ЯМР
5. Ядерный эффект Оверхаузера
6. Основные методы 1D-спектроскопии ЯМР (NOESY, NOCSY, NEPT, DEPT)
7. Принципы двумерной спектроскопии
8. Гомоядерная корреляционная 2D спектроскопия COSY, ROESY
9. Гетероядерная корреляционная 2D спектроскопия HMQC
10. Гетероядерная корреляционная 2D спектроскопия HMBC

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме: устного опроса (индивидуальный опрос); лабораторные работы; оценки результатов практической деятельности (курсовая работа). Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практическое задание, позволяющее оценить степень сформированности умений и навыков.

При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.