

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
органической химии



Шихалиев Х.С.
подпись, расшифровка подписи
26.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.03.01 Избранные главы органической химии

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация:

Органическая химия

3. Квалификация выпускника: магистр

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: кафедра органической химии

6. Составители программы: Крысин Михаил Юрьевич, д.х.н., доцент

(ФИО, ученая степень, ученое звание)

7. Рекомендована:

Научно-методическим Советом химического факультета, 25.04.2023, протокол №4
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2024-2025

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целью освоения учебной дисциплины является:

овладение современными методами подтверждения структуры органических соединений на основании данных спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР-спектроскопии)

Задачи учебной дисциплины:

- уметь правильно подтверждать структуру органического соединения на основании данных ЯМР-спектров.
- знать принципы ядерного эффекта Оверхаузера.
- уметь применять результаты корреляционной 2D – гомо- и гетероядерной ЯМР-спектроскопии для доказательства строения регио- и стереоизомеров

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

часть, формируемая участниками образовательных отношений блока Б1.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК -2	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области органической и химии	ПК -2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий	Знать: теоретические основы гомо- и гетероядерного двойного ЯМР Уметь: правильно выбирать метод ЯМР спектроскопии для подтверждения структуры органического соединения на основании данных ЯМР-спектров. Владеть: навыками применения результатов корреляционной 2D – гомо- и гетероядерной ЯМР-спектроскопии для доказательства строения регио- и стереоизомеров.
		ПК -2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	
ПК -3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области органической химии	ПК -3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	Знать: особенности применения гомо- и гетероядерного двойного ЯМР для установления структуры органических соединений. Уметь: систематизировать и сопоставлять экспериментальные и литературные данные в соответствии с поставленной исследовательской задачей. Владеть: навыками анализа полученных результатов для определения и выбора перспективных направлений развития работ и практического применения
		ПК -3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 4/144.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость	
	Всего	По семестрам
		3 семестр
Аудиторные занятия	56	56
в том числе:	лекции	18
	практические	38
	лабораторные	
Самостоятельная работа	88	88
Форма промежуточной аттестации (зачет с оценкой)		
Итого:	144	144

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	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.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=4957
1.2	Ядерный эффект Оверхаузера	Природа, практические следствия, гомо- и гетероядерный эффект, техника измерения, разностные спектры, требования к образцам.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=4957
1.3	2D – гомо- и гетероядерная ЯМР-спектроскопия	Методики гомоядерной и гетероядерной корреляционной спектроскопии для доказательства структуры органических соединений.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=4957
2. Практические занятия			
2.1	Основные представления о ЯМР-спектроскопии	Обработка одномерных и двумерных спектров ЯМР	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=4957
2.2	Ядерный эффект Оверхаузера	Гомо- и гетероядерный эффект, техника измерения, разностные спектры, требования к образцам.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=4957
2.3	2D – гомо- и гетероядерная ЯМР-спектроскопия	Доказательства структуры органических соединений на основании данных двумерных ЯМР-спектров.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=4957
3. Лабораторные занятия			

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Основные представления о ЯМР-спектроскопии	6	12		30	48
2	Ядерный эффект Оверхаузера	6	12		30	48
3	2D – гомо- и гетероядерная ЯМР-спектроскопия	6	14		28	48
	Итого:	18	38		88	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Организация изучения дисциплины предполагает следующие виды работ студентов: с конспектами лекций; выполнение заданий преподавателя при подготовке к занятиям по наиболее сложным разделам дисциплины с использованием основной и дополнительной литературы, а также интернет-ресурсов.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа как форма организации учебной работы предусматривает следующие ее виды:

- повторение лекционного материала;
- изучение учебной, учебно-методической литературы и иных источников по инструментальным методам анализа и их применению;
- подготовка к зачету с оценкой.

Цель самостоятельной работы – это углубление и расширение знаний в области физико-химических методов анализа органических веществ; формирование навыка и интереса к самостоятельной познавательной деятельности, что послужит в будущем основанием для написания выпускной квалификационной работы.

В процессе изучения курса необходимо обратить внимание на самоконтроль знаний. С этой целью обучающийся после изучения каждой отдельной темы и затем всего курса по учебнику и дополнительной литературе должен проверить уровень своих знаний с помощью контрольных вопросов, которые помещены в конце каждой темы.

Для самостоятельного изучения отводятся темы, хорошо разработанные в учебных пособиях, научных монографиях и не могут представлять особенных трудностей при изучении.

Самостоятельная работа реализуется: непосредственно в процессе аудиторных занятий на кафедре при выполнении лабораторных работ; в библиотеке, дома.

Методические рекомендации по подготовке к зачету с оценкой

При подготовке к зачету с оценкой обучающийся должен повторить пройденный материал в соответствии с учебной программой, примерным перечнем учебных вопросов, выносящихся на зачет и содержащихся в данной программе, используя конспект лекций и рекомендованную литературу. При необходимости может обратиться за консультацией и методической помощью к преподавателю.

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	Ярышев, Н. Г. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе : учебное пособие / Н. Г. Ярышев, Ю. Н. Медведев, М. И. Токарев, А. В. Бурихина, Н. Н. Камкин - Москва : Прометей, 2015. - 196 с. - ISBN 978-5-9906134-6-1. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785990613461.html
2	Бёккер, Ю. Спектроскопия : руководство / Ю. Бёккер. — Москва : Техносфера, 2009. — 528 с. — ISBN 978-5-94836-220-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/73013

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Преч Э. Определение строения органических соединений / Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер ; пер. с англ. Б.Н. Тарасевича .— М. : Мир : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006 .— 439 с.
4	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 (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
5	Сайт Зональной Научной библиотеки Воронежского государственного университета. —Режим доступа: http://www.lib.vsu.ru
6	ЭБС «Университетская библиотека online», http://biblioclub.ru/
7	ЭБС «Консультант студента», http://www.studmedlib.ru
8	Электронно-библиотечная система "Лань" https://e.lanbook.com/

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

№ п/п	Источник
1	Современные методы синтеза гетероциклических соединений : учебно-методическое пособие для вузов / сост. : Х.С. Шихалиев, М.Ю. Крысин, Н.В. Столповская, А.В. Зорина .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр Научная книга, 2012 .— 21 с.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ, электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

18. При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ) в части освоения лекционного материала, проведения текущей и промежуточной аттестации, проведения части лабораторных работ и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для электронного обучения (ЭО) (п. 15).

Для достижения цели освоения учебной дисциплины, повышения качества образования и формирования компетенций используются аудиторные (лекции, лабораторные, практические) и внеаудиторные/интерактивные (самостоятельная работа студентов) формы обучения.

Аудиторные:

Основными видами аудиторной работы являются лекции, практические и лабораторные работы. Они решают задачи формирования и развития профессиональных умений и

навыков обучающихся.

Лекции включают в себя последовательное изложение материала преподавателем в том числе с использованием мультимедийного проектора для компьютерной презентации и видеоматериалов.

Практические работы – форма организации обучения, интегрирующая теоретико-методологические знания, практические умения и навыки студентов в едином процессе учебно-исследовательского характера.

В ходе выполнения практических заданий студенты вырабатывают умения анализировать, делать выводы и обобщения для решения конкретных научно-исследовательских задач.

Внеаудиторные:

Работа в глобальной сети (использование Интернет-технологий), поиск научной и методической информации.

19. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Специализированная мебель, ноутбук, проектор

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

По решению кафедры оценки экзамен могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре, но не ранее, чем на заключительном занятии. При несогласии студента с оценкой последний вправе сдавать экзамен на общих основаниях.

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основные представления о ЯМР-спектроскопии	ПК-2	ПК-2.1 ПК-2.2	Устный опрос
2.	Ядерный эффект Оверхаузера	ПК-2 ПК-3	ПК-2.1 ПК-2.2 ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос; контрольная работа
3.	2D – гомо- и гетероядерная ЯМР-спектроскопия	ПК-2, ПК-3	ПК-2.1 ПК-2.2 ПК-3.1 ПК-3.2	Устный опрос, контрольная работа
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Перечень вопросов

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольные работы

Варианты заданий для контрольной работы:

1. ЯМР расшифровывается как:

- ядерный магнитный резонанс
- ядерный молекулярный резонанс
- ядерный магнитный ренесанс

2. Химический сдвиг - это:

- сдвиг атома под действием химии
- смещение частоты проявления ядра под действием химического окружения
- медицинский термин

3. Количественная характеристика спин-спинового взаимодействия:

- дельта
- переменная
- константа

4. Единица измерения химического сдвига, независящая от частоты:

- Гц
- м.д.
- нм

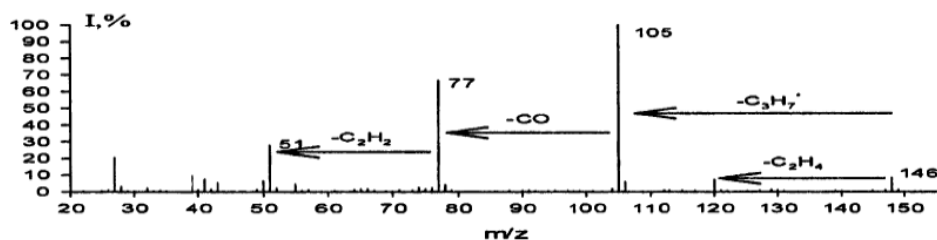
5. Мультиплетность сигнала метильной группы в составе этильного заместителя:

- синглет
- дублет
- триплет

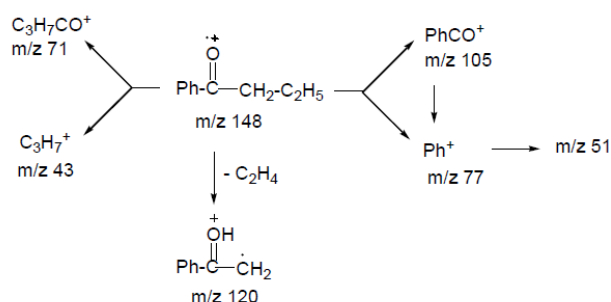
6. Мультиплетность сигналов протонов в составе фрагмента $-O-CH(Cl)-CH_2-NO_2$:

- триплет, триплет
- триплет, дублет
- синглет, синглет

Составьте схему фрагментации бутирофенона, масс-спектр которого представлен ниже.



Ответ: Схема фрагментации бутирофенона



Описание технологии проведения контрольной работы

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

Билет с заданиями контрольной работы обучающийся выбирает из числа предложенных и перед ответом ему предоставляется время для подготовки, обычно 40-45 мин.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Для оценивания результатов контрольной работы используется шкала: «зачтено», «не зачтено».

Оценка	Критерии оценок
Зачтено	При решении заданий контрольной работы продемонстрировано знание теоретических основ дисциплины, умение применять теоретические знания для решения практических задач.
Не зачтено	При решении заданий контрольной работы студент демонстрирует отсутствие знаний теоретических основ дисциплины, он не может применить полученные теоретические знания для решения задач.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к зачету с оценкой

Перечень вопросов к зачету с оценкой:

1. Физические основы ЯМР. Магнитные ядра. Параметры спектров ЯМР (химический сдвиг, интенсивность сигнала, константа спин-спинового взаимодействия).
2. Практика использования спектроскопии ЯМР для решения химических проблем
3. Прямое и не прямое спин-спиновое взаимодействие.
4. ЯМР ^1H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Углеводороды.
5. Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР ^1H . Константы спин-спинового взаимодействия (КССВ).
6. Гомо- и гетероядерные ЯЭО.
7. Спектроскопия ЯМР ^{19}F .
8. ЯМР ^1H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Функциональные производные углеводородов.
9. Химический сдвиг.
10. Взаимосвязь КССВ и структуры органических соединений.
11. Двумерная ЯМР спектроскопия. Корреляционные спектры.
12. ЯМР ^1H спектроскопия отдельных классов органических соединений. Амины, амиды.

13. Применение ЯЭО для установления структуры веществ.
14. ЯМР ¹H спектроскопия отдельных классов органических соединений (оксосоединения).
15. Спектроскопия ЯМР ¹³C.

Описание технологии проведения

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, позволяющие оценить степень сформированности умений.

Технология проведения зачета с оценкой

1. Выдача билетов к зачету с оценкой и чистых листов ответов. (Билеты к зачету с оценкой выдаются обучающимся индивидуально).
2. Фиксирование времени начала и доведение до студентов времени окончания зачета с оценкой.
3. Ответы обучающихся на билеты к зачету с оценкой в письменном виде с заполнением листов ответов. (При необходимости в них кроме текста приводятся рисунки, схемы, таблицы, диаграммы).
4. Сбор билетов к зачету с оценкой и листов ответов.
5. Проверка листов ответов и выставление оценок.

Во время зачета с оценкой обучающимся запрещается разговаривать, ходить по аудитории, пользоваться сотовыми телефонами, шпаргалками, конспектами, учебниками и другой учебно-методической литературой, а также вносить пометки в экзаменационные билеты. Студенты, нарушившие перечисленные требования, удаляются с зачета с оценкой.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

При оценивании результатов обучения на зачете с оценкой используются следующие показатели:

- 1) знание учебного материала дисциплины;
- 2) умение применять теоретические знания для решения практических задач;
- 3) владение теоретическими основами дисциплины, способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения на зачете с оценкой используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Показатели достижения заданного уровня освоения компетенции:

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом дисциплины, но допускает отдельные ошибки при ответах на вопросы.	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, не умеет применять теоретические знания для решения практических задач.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Неудовлетворительно

Тесты с выбором правильного ответа из предложенных возможных.

1. МЕТОД ЯМР ...

- 1) основан на анализе спектров люминесценции в процессе ЯМР
- 2) используют для анализа веществ, в структуре которых имеются атомы с ядрами с нечетным числом протонов
- 3) основан на взаимодействии веществ с электромагнитным излучением в микроволновом диапазоне
- 4) используют для анализа веществ, в структуре которых имеются атомы с ядрами, обладающими спиновым числом, отличным от 0.

2. В СПЕКТРЕ ЯМР ^1H МУЛЬТИПЛЕТНОСТЬ СИГНАЛОВ ПРОТОНОВ МЕТИЛЕНОВЫХ ГРУПП В СТРУКТУРЕ $\text{X}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{Y}$

- 1) дублет, дублет
- 2) квартет, дублет
- 3) триплет, триплет
- 4) триплет, синглет

3. В ИК-СПЕКТРАХ ЧИСЛО И ИНТЕНСИВНОСТЬ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП ЗАВИСИТ ОТ

- 1) возможности образования межмолекулярных водородных связей
- 2) гибридизации C-атома, связанного с OH-группой
- 3) влиянием соседних групп
- 4) функциональными особенностями OH-группы

4. В ИК-СПЕКТРАХ ПЕРВИЧНЫХ АМИНОВ В РАЗБАВЛЕННЫХ РАСТВОРАХ ЧИСЛО ПОЛОС ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ N-H РАВНО

- 1) 2
- 2) 1
- 3) 4
- 4) 3

5. В МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ СТРУКТУРА КЛАСТЕРА ПИКОВ В ОБЛАСТИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА ОБУСЛОВЛЕНА

- 1) зарядом иона
- 2) массой изотопа
- 3) изотопным составом элементов, входящих в структуру органического соединения
- 4) положением элемента в Периодической системе

Тесты без предложенных возможных вариантов ответа

1. В ИК-СПЕКТРОСКОПИИ КОЛЕБАНИЯ АТОМНОЙ ГРУППИРОВКИ, ДЛЯ КОТОРОЙ СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ СВЯЗЕЙ ИЛИ МАССЫ СИЛЬНО ОТЛИЧАЮТСЯ ОТ ОСТАЛЬНОЙ ЧАСТИ МОЛЕКУЛЫ НАЗЫВАЮТСЯ _____

2. ПРИ ПОГЛОЩЕНИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРОИСХОДЯТ ИЗМЕНЕНИЯ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ _____

3. В ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ СОПРЯЖЕННЫХ ФРАГМЕНТОВ ПО СРАВНЕНИЮ С НЕСОПРЯЖЕННЫМИ, КАК ПРАВИЛО _____

4. МЕТОД МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ОСНОВАН НА _____

5. В ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ РАСЩЕПЛЕНИЕ СИГНАЛОВ В МУЛЬТИПЛЕТЫ ОБУСЛОВЛЕНО ВЛИЯНИЕМ _____