

Федеральное государственное
бюджетное образовательное
учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«20» мая 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Углубленный курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Органическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>ОПК-1.С. Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ОПК-1.С.3. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов в органической химии</p>	<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p>
<p>СПК-1.С. Способен использовать фундаментальные понятия органической химии и основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений при решении задач профессиональной деятельности</p>	<p>СПК-1.С.1 Предлагает возможные механизмы реакций с участием органических соединений. Использует комплексную методику расшифровки сложного спектра ЯМР.</p>	<p>Знать: Физические основы явления ЯМР и методы его описания в терминах классической электродинамики и квантовой механики. Основные одномерные и двумерные эксперименты. Современные методы определения строения органических соединений. Уметь: Расшифровать мультиплетную структуру спектров ЯМР в рамках модели основных спиновых систем, установить структуру неизвестного соединения по совокупности данных спектров ЯМР ^1H, ^{13}C, гомо- и гетероядерных корреляционных экспериментов. Владеть: Комплексной методикой расшифровки сложного спектра ЯМР и методикой установления структуры неизвестного соединения по данным спектров ЯМР высокого разрешения.</p>

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 76 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов- занятия семинарского типа, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен:

знать: основные методы предсказания и теоретического расчета химических сдвигов и констант спин-спинового взаимодействия.

Методы определения механизма, кинетических и термодинамических параметров динамических процессов.

уметь: пользоваться современными подходами при определении строения сложных молекул и состава сложных молекулярных систем

владеть: основными химическими теориями, концепциями, законами, описывающими физико-химические явления, применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточно й аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего

Раздел 1. Расшифровка мультиплетной структуры спектров ЯМР.	16	8	8				16			
Раздел 2. Импульсная и Фурье-спектроскопия.	12	6	6				12			
Раздел 3. Двумерная спектроскопия ЯМР.	8	4	4				8			
Раздел 4. Аналитические аспекты спектроскопии ЯМР.	20	10	10				20			
Раздел 5. Расшифровка структуры неизвестных соединений.	16	8	8				16			
Итоговая аттестация <u>экзамен</u>	36					4	4			32
Итого	108	36	36			4	76			32

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Конспект лекций.

8. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература:

1. А. Дероум Современные методы ЯМР для химический исследований, 1992.
2. Х. Гюнтер Введение в курс спектроскопии ЯМР, 1984.
3. Н. М. Сергеев, "Спектроскопия ЯМР", 1981.
4. T. D. W. Claridge High resolution NMR technique in Organic Chemistry, 2nd edition, 2008.
5. В. С. Туманов Введение в теорию спектров ЯМР, 1988.

Дополнительная литература

1. А. Бакс, Двумерный ядерный магнитный резонанс в жидкости, 1988.
2. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Вокаун, Спектроскопия ЯМР в одном и двух измерениях, 1990.
3. Б. Блюмих *Основы ЯМР*, 2011.
4. Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл, Спектрометрическая идентификация органических соединений, 2011.

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные базы данных, использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса, преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ

Демонстрационные материалы к углубленному курсу лекций по спектроскопии ЯМР опубликованы на сайте www.nmr-online.ru.

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: Чертков Вячеслав Алексеевич дхн, внс; Сергеев Николай Михайлович дхн, снс

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Материалы к текущей (контрольные работы, вопросы к коллоквиумам и пр.), промежуточной аттестации (вопросы к экзамену или зачету)

Пример вопроса на контрольной работе по разделу 1:

“Расшифруйте приведенный спектр ЯМР (в качестве раздаточного материала учащимся предоставляется расписанный спектр спиновой системы типа АВХ, А2В, АА'ХХ' или АМРХ)”.

Пример вопроса на контрольной работе по разделу 5:

Бесцветное кристаллическое вещество “test Q” достаточно широко распространено в живой природе. Оно имеет молекулярную массу в диапазоне от 150 до 200 г/моль. Находит применение в фармацевтической промышленности как исходное соединение в синтезе лекарственных препаратов. Оно состоит из атомов углерода, водорода и кислорода. Ниже приведены спектры ЯМР соединения “test Q”. Найдите брутто-формулу этого вещества, расшифруйте его молекулярную структуру и опишите ход решения.

Вопросы к экзамену:

1. Дать примеры ядер с разными спинами. Что такое гиромагнитная постоянная? В чем состоят условия резонанса?
2. Продольная релаксация (T_1) и поперечная релаксация (T_2). Проявление в спектрах ЯМР и методы измерения.
3. Сравнить магнитную энергию с тепловой. Что такое квадрупольный момент ядра? Ядра наиболее подходящие для спектроскопии ЯМР.
4. Критерии чувствительности. Измерение отношения сигнал/шум.
5. Что такое непрерывная развертка в спектрометрах ЯМР? Принцип спектрометра ЯМР с Фурье преобразованием.
6. Факторы, влияющие на чувствительность в спектроскопии ЯМР.
7. Характеристики высокочастотного импульса. Что такое сигнал спада свободной индукции? Прямое и обратное Фурье преобразование.
8. Блок-схема спектрометра ЯМР.
9. Действия различных высокочастотных импульсов.(импульсы π , $\pi/2$). Наиболее важные узлы современного спектрометра ЯМР. Форма и характеристики линии ЯМР.
10. Динамический диапазон и разрешение АЦП.
11. Диполь-дипольные уширения. Что такое экранировка ядер? Абсолютная шкала протонных химических сдвигов.
12. Радиочастотное поле и понятие о лабораторной и вращающейся системе координат.
13. Что такое косвенное спин-спиновое взаимодействие? Форма мультиплетов типа A_nX_m . Треугольник Паскаля для мультиплетов для ядра А в системе AX_n (для X спин $\frac{1}{2}$ и 1).
14. Действие радиочастотных импульсов на намагниченность образца. Дать примеры.

15. Установление структуры органических соединений и методы двойного резонанса для расшифровки спектров ЯМР. Гомоядерная и гетероядерная развязка.
16. Двумерная спектроскопия ЯМР – основная идеология. Классификация двумерных экспериментов.
17. Что такое сдвигающие реагенты? Что такое шкала времени ЯМР? Химическая и магнитная эквивалентность.
18. Принципы генерации и обработки двумерных спектров ЯМР. Схема эксперимента Джинера. Реальное и виртуальное время выборки данных.
19. Спиновая диаграмма и типы переходов. Что такое сильная связь спинов? Вид спинового гамильтониана.
20. Перенос намагниченности и “помечение” частот. Диагональные и кросс-пики.
21. Прямая и обратная задачи анализа спектров. Мультипликативные функции, факторизация гамильтониана. Закономерности для спектров спиновых систем АВ.
22. Методы обработки двумерных спектров. Причины возникновения шумов по t_1 . Симметризация двумерных спектров COSY.
23. Закономерности для спиновых систем АВХ. Спиновые системы AA'XX' и AA'BB'. Итерационные программы анализа спектров ЯМР.
24. Форма линии двумерных сигналов ЯМР и ограничения, вызываемые цифровым разрешением. Фазочувствительные двумерные эксперименты.
25. Магнетон Бора и ядерный магнетон. Радиочастотные методы – ЭПР. ЯМР и ЯКР. Зеемановские уровни энергии.
26. Эксперимент АРТ.
27. Выборка сигналов в импульсном ЯМР. Твердотельный ЯМР.
28. Эксперимент INEPT.
28. Динамический ЯМР – области применения. Медленный и быстрый обмен. Точка коллапса.
30. Эксперимент DEPT.
31. Применения ЯМР в метабомике. Сравнение с возможностями масс-спектрометрии.
32. Эксперимент COSY.
33. Применение ЯМР в аналитической химии. Использование абсолютных и относительных интенсивностей для количественного анализа. Внутренние и внешние ЯМР эталоны.
34. Эксперименты COSY-45 и COSY-LR.
35. Система ЯМР-стабилизации (Lock) и настройка разрешения.
36. Эксперимент HSQC.
37. Свойства дейтерированных растворителей. Приготовление образцов.
38. Эксперимент HMBSC.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: Физические основы явления ЯМР и методы его описания в терминах классической электродинамики и квантовой механики. Основные одномерные и двумерные эксперименты. Современные методы определения строения органических соединений.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Уметь: Расшифровать мультиплетную структуру спектров ЯМР в рамках модели основных спиновых систем, установить структуру неизвестного соединения по совокупности данных спектров ЯМР ^1H , ^{13}C , гомо- и гетероядерных корреляционных экспериментов.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения Владеть: Комплексной методикой расшифровки сложного спектра ЯМР и методикой установления структуры неизвестного соединения по данным спектров ЯМР высокого разрешения.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене

