

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 30.10.2023 17:06:28  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной и методической работе

\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский

« 21 » февраля 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР**

Направление подготовки

**04.04.01 Химия**

Направленность образовательной программы

**Синтетическая органическая химия**

Квалификация

**Магистр**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **химической и биотехнологии**

Кафедра **органической химии**

Санкт-Петербург

2023

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчик		доцент Селиванов С.И.

Рабочая программа дисциплины «Б1.ДВ.2» обсуждена на заседании кафедры органической химии  
протокол от 23 января 2023 г. № 5

Заведующий кафедрой

М.Л. Петров

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии  
протокол от 06 февраля 2023 г. № 6

Председатель

М.В. Рутто

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки		М.Л. Петров
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З. Труханович
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	04
3. Объем дисциплины .....	05
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	05
4.2. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа.....	08
4.3.1. Семинары, практические занятия .....	08
4.3.2. Лабораторные занятия.....	09
4.4. Самостоятельная работа.....	09
4.5. Темы контрольных работ.....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	10
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	11
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	12
10.2. Программное обеспечение.....	12
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	12
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	13
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	13

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы 04.04.01 магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине.

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
<b>ПК-1</b> Способен планировать исследование, выбирать методы решения поставленных задач и проводить научно-исследовательскую работу в области органической химии и смежных наук	<b>ПК-1.9</b> Владение физико-химическими основами спектроскопии ЯМР и способность применения основных методик спектроскопии ЯМР для решения прикладных задач в области профессиональной деятельности	<b>Знать:</b> физико-химические основы спектроскопии ЯМР, современные достижения в области спектроскопии ЯМР и их применение для исследования и доказательства строения органических молекул <b>Уметь:</b> применять навыки исследования строения органических соединений методом спектроскопии ЯМР <b>Владеть:</b> современными методиками спектроскопии ЯМР для исследования и установления строения органических соединений

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы<sup>1</sup>.

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.ДВ.2), и изучается на 1 курсе во 2 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Идентификация и определение строения органических соединений», «Информатика в органической химии».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Современные тенденции спектроскопии ЯМР» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе и при выполнении выпускной квалификационной работы.

<sup>1</sup> Место дисциплины будет учитываться при заполнении таблицы 1 в Приложении 1 (Фонд оценочных средств)

### 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	4/144
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>74</b>
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	18 (4)
лабораторные работы	18
курсовое проектирование (КР или КП)	–
КСР	2
другие виды контактной работы	
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>34</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	Кр
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	Экзамен (36)

### 4. Содержание дисциплины.

#### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Современная многоимпульсная Фурье-спектроскопия ЯМР и ее возможности по определению значений спектральных и релаксационных характеристик органических и биоорганических молекул в растворе. Основные этапы развития многомерных корреляционных методов ЯМР-анализа.	20	10	6	22	ПК-1	ПК-1.9

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
2.	Современные тенденции использования спектроскопии ЯМР в химии, молекулярной биологии, медицинской физике и материаловедении.	16	8	12	12	ПК-1	ПК-1.9

#### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	История перехода спектроскопии ЯМР на импульсный способ регистрации сигнала свободной индукции (ССИ) и его Фурье-преобразование в спектр ЯМР	2	ЛВ <sup>2</sup>
1	Развитие импульсных методов широкополосной развязки от протонов в спектроскопии ЯМР на редких ядрах <sup>13</sup> C и <sup>15</sup> N	2	ЛВ
1	Конструктивные особенности датчика ЯМР для импульсной регистрации и переход к двухканальному квадратурному детектированию.	2	ЛВ
1	Широкополосные 90-градусные и 180-градусные радиочастотные импульсы и частота нутации в условиях резонанса	2	ЛВ
1	Эксперименты Джинера по двумерному представлению спектральной информации. Цифровое разрешение по F2- и F1-осям двумерного спектра	2	ЛВ

<sup>2</sup> Примеры образовательных технологий, способов и методов обучения (с сокращениями): традиционная лекция (Л), лекция-визуализация (ЛВ), проблемная лекция (ПЛ), лекция – пресс-конференция (ЛПК), занятие – конференция (ЗК), тренинг (Т), дебаты (Д), мозговой штурм (МШ), мастер-класс (МК), «круглый стол» (КрСт), активизация творческой деятельности (АТД), регламентированная дискуссия (РД), дискуссия типа форум (Ф), деловая и ролевая учебная игра (ДИ, РИ), метод малых групп (МГ), занятия с использованием тренажеров, имитаторов (Тр), компьютерная симуляция (КтСм), использование компьютерных обучающих программ (КОП), интерактивных атласов (ИА), посещение врачебных конференции, консилиумов (ВК), участие в научно-практических конференциях (НПК), съездах, симпозиумах (Сим), учебно-исследовательская работа студента (УИРС), проведение предметных олимпиад (О), подготовка письменных аналитических работ (АР), подготовка и защита рефератов (Р), проектная технология (ПТ), экскурсии (Э), дистанционные образовательные технологии (ДОТ).

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	Источники фазовых искажений в импульсной 1D и 2D спектроскопии ЯМР и их устранение. Происхождение $t_1$ -шумов в 2D спектрах ЯМР и способы их устранения	2	ЛВ
1	Искажения базовой линии (или базовой плоскости) в 1D и 2D спектрах ЯМР и их коррекция	1	ЛВ
1	Основные проблемы анализа протонных спектров ЯМР: перекрывание сигналов и сильносвязанность спиновых систем. Способы упрощения спектров $^1\text{H}$ ЯМР	1	ЛВ
1	Разложение спектров $^1\text{H}$ по частотам скалярно-связанных протонов и/или гетероядер $^{13}\text{C}$ и $^{15}\text{N}$	2	ЛВ
1	Разделение взаимодействий в спектроскопии ЯМР на основе импульсной последовательности спинового эха. Метод J-resolved COSY	2	ЛВ
1	Специальные методы широкополосной развязки протонных спектров на основе метода J-COSY или применения специальных импульсных последовательностей (Pure Shift NMR)	2	ЛВ
2	Градиентные импульсы и их использование в спектроскопии ЯМР. Спектральное разделение сложных смесей на основе спектроскопии DOSY (Diffusion Ordered Spectroscopy)	2	ЛВ
2	Инверсные методы регистрации гетероядерных корреляций HSQC, HMQC, HMBC, H2BC/	2	ЛВ
2	Двух-квантовые фильтры в методах INADEQUATE и DQF-COSY. Активные и пассивные скалярные константы в спектроскопии ЯМР	2	ЛВ
2	Когерентные состояния двух- и трех-спиновых систем в процессе многоимпульсных последовательностей. Описание импульсных экспериментов с помощью произведения односпиновых операторов	2	ЛВ
2	Чувствительность спектроскопии ЯМР и способы ее повышения. Количественная спектроскопия ЯМР (qNMR) и ее использование в метаболомике и при анализе сложных смесей	2	ЛВ
2	Использование RDC-подхода (Residual Dipolar Coupling) в структурных исследованиях	2	ЛВ
2	Спектроскопия ЯМР в <i>On-Line</i> комбинации с жидкостной хроматографией и масс-спектрометрией (LC-NMR, LC-MS-NMR)	2	ЛВ
2	Методология точного измерения межъядерных расстояний на основе данных eNOE (exact NOE) в структурных исследованиях и для обнаружения минорных конформеров	2	ЛВ

### 4.3. Занятия семинарского типа.

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
1	ЯМР макромолекул. Структура и динамика мембранных белков на основе данных ЯМР	4		КрСт
1	Быстрые многомерные ЯМР-эксперименты. NUS (Non-uniform Sampling) и другие новые методы	2		КрСт
1	Спектроскопия ЯМР в твердых телах (SSNMR - Solid State NMR) и способы сужения спектральных линий. (CP-MAS, WHH-8)	4		Групповая дискуссия
2	Комбинированное использование гомо- и гетероядерных методов ЯМР для установления структуры и конформации молекул в растворе	4	2	МШ
2	Использование релаксационных методов исследования динамики кристаллических, аморфных и жидких веществ и материалов	4	2	КрСт

#### 4.3.2. Лабораторные работы

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечания
1	Освоение новых возможностей программы обработки спектров ЯМР в одном и двух измерениях MestReNOVA, на примере решения структурных задач с помощью комбинированного использования ЯМР-методов	4	
1	“Параллельная” спектроскопия ЯМР на основе нескольких отдельных микродатчиков и параллельной одновременной сверхбыстрой регистрацией различных nD спектров ЯМР	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечания
2	Использование компьютерного моделирования результатов ЯМР-экспериментов как эффективный способ решения сложных структурных и динамических задач	6	
2	Процедуры предварительной обработки спектров NOESY и их использование для оценок межпротонных расстояний	6	

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Уравнение Блоха для описания релаксационных явлений	2	Устный опрос
1	Уравнение Карплуса и его современные модификации	6	Устный опрос
1	Приближение изолированной спиновой пары (ISPA) и ограничения Соломона при выводе	6	Устный опрос
1	Закон Лармора для магнитного момента в магнитном поле	2	Устный опрос
1	Преобразование Фурье для перехода от временного к спектральному представлению	4	Устный опрос
1	Переход от лабораторной к вращающейся системе координат (ВСК) при описании ЯМР	2	Устный опрос
2	Резонансное взаимодействие ядерных спинов с радиочастотным импульсом	2	Устный опрос
2	Свободная прецессия ядерных спинов вокруг постоянного поля $B_0$ и нутация макроскопического вектора намагниченности	2	Устный опрос
2	Релаксационная матрица (R) и ее диагональные (ii) и внедиагональные (ij и ji) элементы.	2	Устный опрос
2	Влияние электроотрицательности заместителей в этановом фрагменте на величину вицинальной константы $^3J_{H-H}$	2	Контрольная работа №1
2	Ограниченное применение векторной модели Блоха для описания спиновой динамики	2	Устный опрос
2	Произведение односпиновых операторов для описания динамики слабосвязанных спиновых систем	2	Контрольная работа №1

#### 4.5. Темы контрольных работ.

**Контрольная работа № 1.** Визуальные константы  ${}^3J_{H-H}$ . Зависимость величины от двугранного угла  $\theta_{ij}$  в этановом фрагменте и от электроотрицательности заместителей в  $\alpha$ - и  $\beta$ -положениях. Пример вычисления  ${}^3J_{H-H}$  для заданной структуры.

**Контрольная работа №2.** Ядерный эффект Оверхаузера между протонами.. Использование для оценки межпротонных расстояний с помощью калибровочного метода. Пример вычисления величины ЯЭО для заданной структуры.

#### 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медия: <http://media.technology.edu.ru>

#### 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена (2 семестр).

К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Экзамен предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков). При сдаче экзамена, студент получает три вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу – до 45 мин.

Пример варианта вопросов на экзамене:

##### Вариант № 1

1. Векторная модель Ф.Блоха описания динамического поведения ансамбля одинаковых магнитных ядер в постоянном ( $B_0$ ) и переменном  $B_1$  полях. Закон Лармора. Резонансное взаимодействие. Ограничения для использования векторной модели.
2. Спектроскопия ЯМР на ядрах  ${}^1H$ . Шкала химических сдвигов и основные факторы, влияющие на положение сигналов в протонном спектре.
3. Методы анализа мультиплетной структуры сигналов в одномерных спектрах ЯМР.

Пример задачи: Укажите ожидаемую мультиплетность сигналов в спектре ЯМР  ${}^1H$  указанных соединений и дайте обоснование ответа.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

## 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

### а) печатные издания:

1. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2011 - Ч. 1 : Общие вопросы спектроскопии. - 5-е изд. - 2011. - 236 с. : ил. - Библиогр.: с. 204-226. - ISBN 978-5-397-01833-3.
2. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2007 - 2009. - Ч. 2 : Атомная спектроскопия. - 5-е изд. - 2009. - 415 с. : ил. - Библиогр.: с. 204-226. - ISBN 978-5-397-00110-6.
3. Ельяшевич, М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич. - М. : Кн. дом "ЛИБРОКОМ", 2007 - 2009. - Ч. 3 : Молекулярная спектроскопия. - 5-е изд. - 2009. - 527 с. : ил. - Библиогр.: с. 492-513. - ISBN 978-5-397-00055-0.
4. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл ; пер. с англ. Н. М. Сергеева, Б. Н. Тарасевича. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 557 с. : ил. - (Методы в химии). - Библиогр. в конце глав. - ISBN 978-5-94774-392-0.
5. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков: Учебник для химических спец. вузов / Ю. М. Воловенко, В. Г. Карцев, И. В. Комаров и др. - М. : ICSPF PRESS, 2011. - 694 с. : ил. - Библиогр.: с. 680. - ISBN 978-5-903078-34-9.

### б) электронные издания

6. Краснокутская, Е. А. Спектральные методы исследования в органической химии : учебное пособие / Е. А. Краснокутская, В. Д. Филимонов. — Томск : ТПУ, [б. г.]. — Часть II : ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия — 2013. — 88 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/45172> (дата обращения: 28.12.2022). — Режим доступа: по подписке.
7. Агишев, А. Ш. Основы квантовой механики и ЯМР-спектроскопии : учебное пособие / А. Ш. Агишев, И. П. Шишкина, М. А. Агишева. — Казань : КНИТУ, 2013. — 108 с. — ISBN 978-5-7882-1336-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/73341> (дата обращения: 28.12.2022). — Режим доступа: по подписке.
8. Краснокутская, Е. А. Спектральные методы исследования в органической химии : учебное пособие / Е. А. Краснокутская, В. Д. Филимонов. — Томск : ТПУ, [б. г.]. — Часть II : ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия — 2013. — 88 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/45172> (дата обращения: 28.12.2022). — Режим доступа: по подписке.

## 8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

учебный план, РПД и учебно-методические материалы:  
<http://media.technolog.edu.ru>

общие поисковые системы: [www.google.ru](http://www.google.ru),

специальные поисковые системы, сайт МГУ им. Ломоносова:  
<http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/>,

учебные и методические интерактивные программные средства для самостоятельных занятий (домашних работ) студентов размещены в интернете на домашней странице кафедры по адресу: <http://www1.lti-gti.ru/orgchem/>,

электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине «Современные тенденции спектроскопии ЯМР» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2014. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- поиск научной информации по органическим соединениям,
- моделирование физико-химических и спектральных свойств органических соединений.

взаимодействие с обучающимися с помощью ЭИОС

### **10.2. Программное обеспечение.**

Microsoft Office (Microsoft Excel);

MDL ISIS Draw 2.5 редактор структурных химических формул,

Пакет программ ACD/Lab, ACDFree 12 редактор структурных химических формул, расчет физико-химических и спектральных свойств органических соединений,

информационная научная база данных по химическим соединениям [www.reaxy.com](http://www.reaxy.com),-

Программа обработки спектров ЯМР в одном и двух измерениях "MestReNOVA."

### **10.3. Базы данных и информационные системы**

Справочно-поисковая система "Chemnet", химического факультета Московского Государственного университета. [www.chem.msu.ru/rus/elibrary/](http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/)

**11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Для ведения лекционных и практических занятий используется компьютерный класс 50 кв.м., оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть ПК 8 шт. Ноутбук Toshiba L40, мультимедийный проектор Benq MP 511+, экран. Спектрометр BRUKER WM 400,

**12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014г.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Современные тенденции спектроскопии ЯМР»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

<b>Компетенции</b>		
<b>Индекс</b>	<b>Формулировка<sup>3</sup></b>	<b>Этап формирования<sup>4</sup></b>
ПК-1	Способен планировать исследование, выбирать методы решения поставленных задач и проводить научно-исследовательскую работу в области органической химии и смежных наук	промежуточный

<sup>3</sup> **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты)

<sup>4</sup> этап формирования компетенции выбирается по п.2 РПД и учебному плану (начальный – если нет предшествующих дисциплин, итоговый – если нет последующих дисциплин (или компетенция не формируется в ходе практики или ГИА), промежуточный - все другие.)

## 2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
<p><b>ПК-1.9</b> Владение физико- химическими основами спектроскопии ЯМР и способность применения основных методик спектроскопии ЯМР для решения прикладных задач в области профессиональной деятельности</p>	<p><b>Перечисляет:</b> основные достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биорганических соединений в растворе</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №1–50 к экзамену</p>	<p>Перечисляет не все достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биорганических соединений в растворе с ошибками</p>	<p>Перечисляет не все достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биорганических соединений в растворе без ошибок</p>	<p>Перечисляет все достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биорганических соединений в растворе без ошибок и знает их связь со структурой и динамикой молекул.</p>
	<p><b>Выполняет</b> анализ и идентификацию сигналов в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H простых органических молекул или их отдельных фрагментов</p>	<p>Защищает отчеты по лабораторным работам</p>	<p>Выполняет лабораторные работы с ошибками в расчете и неполным описанием эксперимента</p>	<p>Выполняет лабораторные работы без ошибок но не все особенности спектра ЯМР может объяснить</p>	<p>Выполняет, объясняет и подробно описывает лабораторные работы</p>

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	<b>Владеет</b> представлениями о влиянии структурных и конформационных особенностей органических молекул на спектральные и релаксационные ЯМР-параметры	Правильные ответы на вопросы №1–50 к экзамену	Отвечает на вопросы с ошибками подсказками преподавателя	Отвечает на вопросы с небольшими ошибками	Отвечает на вопросы без ошибок и без подсказки преподавателя.

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):  
по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена, шкала оценивания – балльная.

### **3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.**

#### **3.1. Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-1:**

1. Источники магнетизма в диамагнетиках.
2. Ядерный магнетизм и сравнительный анализ “магнитных” изотопов.
3. История открытия ядерного магнитного резонанса в конденсированных средах (в жидкости, твердых телах и газах)
4. Доказательства квантовой природы ядерного магнетизма. (опыты Штерна, Герлаха, Раби, мультиплетность ЯМР-сигналов.)
5. Закон Лармора и Зеемановское расщепление уровней энергии.
6. Использование резонансного поглощения энергии для регистрации сигналов ЯМР.
7. Факторы, определяющие чувствительность сигнала ЯМР.
8. Больцмановское распределение для ансамбля изолированных спинов  $\frac{1}{2}$
9. Время жизни спиновых состояний и разрешающая способность спектров ЯМР
10. Химический сдвиг и его природа. Диапазоны химсдвигов ядер  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  и др.
11. Константа экранирования ( $\sigma$ ) и основные факторы, влияющие на ее величину.
12. Анизотропия экранирования и ее проявление в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$ .
13. Конусы экранирования различных структурных фрагментов молекулы.
14. Флуктуирующие магнитные поля и их роль в спектроскопии ЯМР
15. Источники флуктуирующих полей и релаксационные явления в растворе
16. Теория релаксации и способы регистрации релаксационных характеристик.
17. Связь релаксации с общей и внутримолекулярной динамикой молекул.
18. Диполь-дипольная релаксация и ядерный эффект Оврхаузера (ЯЭО).
19. Релаксация анизотропии химического сдвига
20. Скалярная релаксация 1-го и 2- рода
21. Квадрупольная релаксация и ее проявление в спектрах неквадрупольных ядер
22. Установление механизма релаксации и интерпретация релаксационных данных
23. Скалярные взаимодействия между магнитными ядрами и их проявление в спектрах
24. Природа скалярного взаимодействия и величины констант между парами ядер  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ - $^{15}\text{N}$  (Зависимость  $^1\text{J}_{\text{H-X}}$  от магнитного момента ядра X)
25. Знак скалярных констант  $^n\text{J}_{\text{H-H}}$  и способы его определения
26. Связь гомо- и гетероядерных констант со структурными особенностями молекул
27. Геминальные константы  $^2\text{J}_{\text{H-H}}$  и факторы, влияющие на ее величину.
28. Вицинальные константы  $^3\text{J}_{\text{H-H}}$  и факторы, влияющие на ее величину.
29. Карплюсовская зависимость  $^3\text{J}_{\text{H-H}}$  от диэдрального угла  $\theta$
30. Зависимость  $^3\text{J}_{\text{H-H}}$  в этановом фрагменте от электроотрицательностей заместителей
31. Зависимость  $^3\text{J}_{\text{H-H}}$  в этановом фрагменте от валентных углов
32. Современные модификации Карплюсовской зависимости для  $^3\text{J}_{\text{H-H}}$ .
33. Спектры ЯМР с селективной и широкополосной развязкой от протонов.
34. Методы определения схемы скалярного связывания для простых спиновых систем.

35. Методы спектрального разделения спиновых подсистем.
36. Методы упрощения сложных спектров ЯМР  $^1\text{H}$  с помощью их разложения по химическим сдвигам скалярно-связанных ядер.
37. Дальних скалярные константы  $^{4-6}\text{J}_{\text{H-H}}$  и их зависимость от пространственной ориентации системы ковалентных связей. (Уравнение для  $^{4-6}\text{J}_{\text{H-H}}$ )
38. Специальные методы измерения малых величин дальних скалярных констант
39. Гетероядерные константы  $^{1-4}\text{J}_{\text{C-H}}$  и их использование в структурном и конформационном анализе органических молекул в растворе
40. Гомоядерные скалярные константы  $^{1-3}\text{J}_{\text{C-C}}$  и их использование в структурном и конформационном анализе органических молекул в растворе
41. Способы измерения величин  $^{1-3}\text{J}_{\text{C-C}}$  и Каплусовская зависимость для  $^3\text{J}_{\text{C-C}}$
42. Измерение скоростей кросс-релаксации  $\sigma_{ij}$  (ЯЭО) для оценки межъядерных расстояний  $r_{ij}$  и/или доказательства быстрого (в шкале времени ЯМР) обмена.
43. Приближения изолированной спиновой пары (ISPA) и начальных скоростей (IRA) для устранения эффектов спиновой диффузии при измерении значений ЯЭО.
44. Основные различия в использовании ЯЭО в структурных и конформационных исследованиях малых ( $\omega_0\tau_c \ll 1$ ) и больших ( $\omega_0\tau_c \gg 1$ ) молекул в растворе.
45. Динамическая шкала спектроскопии ЯМР. Применение ДЯМР для изучения быстрых, промежуточных и медленных процессов в малых и больших молекулах.
46. Методологические и экспериментальные особенности изучения больших биомолекул (белков, полипептидов и др.) в растворе.
47. Методология ЯМР-исследования гормон-рецепторных комплексов на основе спектральных и релаксационных измерения.
48. Принципы использования и возможности ЯМР-релаксометрии для количественной оценки качества продуктов и материалов.
49. Перспективы и тенденции развития ЯМР-методов в химии, молекулярной биологии, медицине (ЯМР-метабомика), экологии (*In-vivo* ЯМР) и в различных отраслях пищевой, фармацевтической и нефтеперерабатывающей промышленности, а также для неразрушающего анализа качественного и количественного состава природных продуктов включая живые микро- и макроорганизмы: бактерии, дафнии, одноклеточные – туфелька, черви, малюски и т.д.
50. Принципы работы “параллельного ЯМР”, объединяющего возможности миниатюризации элементов датчика (приемно-передающие микрокатушки), сверхбыстрых методов регистрации (NUS, One Pulse Approach и др.), одновременной обработки нескольких типов экспериментов для нескольких образцов и проточной капиллярной техники смены образца.

К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче экзамена, студент получает три вопроса из перечня, приведенного выше.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы – до 45 мин.

**4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.