

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
СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

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.....	07
4.3.1. Семинары, практические занятия	07
4.3.2. Лабораторные занятия.....	08
4.4. Самостоятельная работа.....	09
4.5. Темы контрольных работ.....	10
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	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	13
10.2. Программное обеспечение.....	13
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	13
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
ПК-1 Способен планировать исследование, выбирать методы решения поставленных задач и проводить научно-исследовательскую работу в области органической химии и смежных наук	ПК-1.9 Владение физико-химическими основами спектроскопии ЯМР и способность применения основных методик спектроскопии ЯМР для решения прикладных задач в области профессиональной деятельности	Знать: физико-химические основы спектроскопии ЯМР, современные достижения в области спектроскопии ЯМР и их применение для исследования и доказательства строения органических молекул Уметь: применять навыки исследования строения органических соединений методом спектроскопии ЯМР Владеть: современными методиками спектроскопии ЯМР для исследования и установления строения органических соединений

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы¹.

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 «Спектроскопия ЯМР в научных исследованиях» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе и при выполнении выпускной квалификационной работы.

¹ 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
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	4/144
Контактная работа с преподавателем:	74
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	
Самостоятельная работа	34
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Презентация, Кр
Форма промежуточной аттестации (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.	Явление ядерного магнитного резонанса и принципы его использования в спектроскопии ЯМР в растворе.	8	6	8	20	ПК-1	ПК-1.9
2.	Основные спектральные и релаксационные параметры спектроскопии ЯМР и их связь со строением и динамикой органических соединений.	28	12	10	14	ПК-1	ПК-1.9

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	История открытия ЯМР и появление спектроскопии и релаксометрии ЯМР. Основные достоинства и недостатки этих методов исследования органических соединений.	2	ЛВ
1	Квантово-механическое и векторное описание внешних и внутренних взаимодействий ядерных магнитных моментов в конденсированных средах.	2	ЛВ
1	Источники магнетизма в диамагнетиках и взаимодействие химического сдвига. Локальные поля соседних групп атомов. Анизотропия экранирования и шкала химических сдвигов ядер ^1H , ^2H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F и ^{31}P .	4	ЛВ
2	Скалярные взаимодействия магнитных ядер между собой и их проявление спектрах ЯМР. Мультиплетность сигналов как источник информации о строении молекул. Спиновые системы магнитных ядер и проявления эффектов связности в спектрах ЯМР. Классификация спиновых систем и особенности их спектров: А-Х, А-В, АВ-Х, АВС, АА'-ХХ' ...	4	ЛВ
2	Стереоспецифичность геминальных (^2J), вицинальных (^3J) и дальних ($^4\text{--}^6\text{J}$) протон-протонных констант и их использование при доказательстве структуры и динамики молекул.	4	ЛВ
2	Гетероядерные скалярные константы $^{1-4}\text{J}_{\text{X-Y}}$ и их проявление в спектрах ядер X и Y ($\text{X} \neq \text{Y}$: ^1H , ^2H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P). "Активные" и "пассивные" константы и экспериментальное определение их происхождения. Изотопный состав ядер и "сателлитные" сигналы в спектрах ЯМР. Связь величин констант $^{1-4}\text{J}_{\text{X-Y}}$ со строением молекул.	4	ЛВ
2	Расчет величин скалярных констант эмпирическими и неэмпирическими методами, Гомоядерные константы $^1\text{J}_{\text{C-C}}$ и их использование для установления углеродного скелета молекул.	2	ЛВ
2	Происхождение и роль флуктуирующих полей в растворе и основные механизмы релаксационных явлений. Связь ЯМР-релаксации с динамикой молекул в растворе.	2	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
2	Диполь-дипольная релаксация и пространственные взаимодействия магнитных ядер. Ядерный эффект Оверхаузера (ЯЭО) и его использование при решении структурных и динамических задач органической и биоорганической химии	4	ЛВ
2	Времена продольной (T_1) и поперечной (T_2) релаксации. Их связь с динамикой молекул и магнитными свойствами соседних ядер. Вклады различных механизмов в наблюдаемые величины T_1 и T_2 .	2	ЛВ
2	Динамический шкала ЯМР. Исследование быстрых и медленных в шкале времени ЯМР процессов. Использование измерений T_1 во вращающейся системе координат ($T_{1\rho}$) и T_2 для количественных оценок скоростей и термодинамических параметров равновесных обменных процессов.	2	ЛВ
2	Возможности спектроскопии ЯМР для исследования быстрых неравновесных реакций и регистрации спектров короткоживущих промежуточных продуктов. Использование спектроскопии ЯМР для изучения метаболизма живых организмов в <i>In-Vivo</i> режиме.	4	ЛВ

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Иновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
1	Разрешающая способность ЯМР спектроскопии как основное достоинство метода. Причины и способы его повышения при решении конкретных структурных и динамических задач.	4		КтСм
1	Низкая (относительно других физических методов исследования) чувствительность спектроскопии ЯМР. Методологические и технические способы ее повышения.	2		КтСм

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
2	Функциональная схема импульсного ЯМР-спектрометра с Фурье-преобразованием и основные правила его эксплуатации (от подготовки образца до получения сигнала свободной индукции).	2		КтСм
2	Выбор импульсного эксперимента и оптимизация параметров регистрации 1D- и 2D-спектров ЯМР как необходимое условие получения необходимой информации для эффективного решения конкретной структурной и/или динамической задачи.	4	4	КтСм
2	Способы упрощения сложных спектров ЯМР с помощью корреляционных многоимпульсных методов. Устранение (или ослабление) эффектов сильносвязанности в спектрах ЯМР	2		КтСм
2	Измерение релаксационных ЯМР-характеристик (T_1 , T_2 , $T_{1\rho}$) и скорости кросс-релаксации σ_{ij} для "малых" ($M < 500$) молекул в растворе. Методология количественной оценки межпротонных расстояний с помощью ЯЭО. Использование температуры коалесценции T_c для определения термодинамических параметров равновесного химического обмена.	4		КтСм

4.3.2. Лабораторные работы

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Примечания
		всего	в том числе на практическую подготовку*	
1	Знакомство с возможностями программы обработки спектров ЯМР в одном и двух измерениях MestReNOVA, включая симуляцию спектров сложных спиновых подсистем.	8		
2	Методология CASE (Computer Assisted Structure Estimation) как эффективный способ установления структуры природных и синтезированных соединений с помощью спектроскопии ЯМР.	8		
2	Интегрирование сигналов в одномерных и двумерных спектрах ЯМР. Количественная ЯМР-спектроскопия.	2		

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	2	Устный опрос
1	Приближение изолированной спиновой пары (ISPA) и ограничения Соломона при выводе формулы для ядерного эффекта Оверхаузера	4	Устный опрос
1	Закон Лармора для магнитного момента в магнитном поле	4	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	4	Устный опрос

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Резонансное взаимодействие ядерных спинов с радиочастотным импульсом	3	Устный опрос
2	Свободная прецессия ядерных спинов вокруг постоянного поля B_0 и нутация макроскопического вектора намагниченности вокруг РЧ-поля B_1 во ВСК	3	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	Устный опрос
2	Ограниченное применение векторной модели Блоха для описания спиновой динамики	2	
2	Произведение односпиновых операторов для описания динамики слабосвязанных спиновых систем	2	

4.5. Темы контрольных работ.

Контрольная работа № 1. Вицинальные константы $^3J_{H-H}$. Зависимость величины от двугранного угла θ_j в этановом фрагменте и от электроотрицательности заместителей в α - и β -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 Медиа: <http://media.technolog.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 предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки понимания) и комплексная задача (для проверки умений и навыков уровня понимания проблемы и способности определения оптимальных путей ее решения на основе полученных теоретических знаний и практических навыков). При сдаче экзамена, студент получает три вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 30 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: 28.03.2023). — 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,

специальные поисковые системы, сайт МГУ им. Ломоносова: <http://www.chem.msu.su/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 «Спектроскопия ЯМР в научных исследованиях» 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 приходить, 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;
построение и визуализация структур органических молекул,
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,-

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/

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

Для ведения лекционных и практических занятий используется большая химическая аудитория 163.7 кв.м.(или к. 15) и Ноутбук Toshiba L40, мультимедийный проектор Benq MP 511+, экран. Компьютерный класс 50кв.м. , оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть ПК 8 шт.

Для проведения лабораторных занятий используется компьютерный класс 50кв.м. (к.10) , оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть ПК 8 шт.

Спектрометр BRUKER WM 40012. 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 «Спектроскопия ЯМР в научных исследованиях»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенции		
Индекс	Формулировка²	Этап формирования³
ПК-1	Способен планировать исследование, выбирать методы решения поставленных задач и проводить научно-исследовательскую работу в области органической химии и смежных наук	итоговый

² **жирным шрифтом** выделена та часть компетенции, которая формируется в ходе изучения данной дисциплины (если компетенция осваивается полностью, то фрагменты)

³ 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)
ПК-1.9 Владение физико- химическими основами спектроскопии ЯМР и способность применения основных методик спектроскопии ЯМР для решения прикладных задач в области профессиональной деятельности	Перечисляет: основные достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биоорганических соединений в растворе	Правильные ответы на вопросы №1-25 к экзамену	Перечисляет не все достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биоорганических соединений в растворе с ошибками	Перечисляет не все достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биоорганических соединений в растворе без ошибок	Перечисляет все достоинства и недостатки спектроскопии ЯМР, спектральные и релаксационные ЯМР-характеристики, используемые для описания спектров органических и биоорганических соединений в растворе без ошибок и знает их связь со структурой и динамикой молекул.
	Выполняет анализ и идентификацию сигналов в спектрах ЯМР ¹ H простых органических молекул или их отдельных фрагментов	Защищает отчеты по лабораторным работам	Выполняет лабораторные работы с ошибками в анализе мультиплетности сигналов и величин констант.	Выполняет лабораторные работы без ошибок но не все особенности структуры сигнала может объяснить	Выполняет, объясняет и подробно описывает лабораторные работы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Владеет представлениями о влиянии структурных и конформационных особенностей органических молекул на спектральные и релаксационные ЯМР-параметры	Правильные ответы на вопросы № 26-50 к экзамену	Отвечает на вопросы с ошибками с 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.
4. Доказательства квантовой природы ядерного магнетизма. (Штерн, Герлах и др.)
5. Прецессия ядерных магнитных моментов в постоянном магнитном поле.
6. Закон Лармора и Зеемановское расщепление уровней энергии.
7. Использование резонансного поглощения энергии для регистрации сигналов ЯМР.
8. Факторы, определяющие чувствительность сигнала ЯМР.
9. Больцмановское распределение для ансамбля изолированных спинов $\frac{1}{2}$
10. Время жизни спиновых состояний и разрешающая способность спектров ЯМР
11. Химический сдвиг и его природа. Диапазоны химсдвигов ядер ^1H , ^{13}C , ^{15}N и др.
12. Константа экранирования (σ) и основные факторы, влияющие на ее величину.
13. Анизотропия экранирования и ее проявление в спектрах ЯМР ^1H .
14. Конусы экранирования различных структурных фрагментов молекулы.
15. Флуктуирующие магнитные поля и их роль в спектроскопии ЯМР
16. Источники флуктуирующих полей и релаксационные явления в растворе
17. Теория релаксации и способы регистрации релаксационных характеристик.
18. Связь релаксации с общей и внутримолекулярной динамикой молекул.
19. Диполь-дипольная релаксация и ядерный эффект Оврхаузера (ЯЭО).
20. Релаксация анизотропии химического сдвига
21. Скалярная релаксация 1-го и 2-го рода
22. Квадрупольная релаксация и ее проявление в спектрах неквадрупольных ядер
23. Установление механизма релаксации и интерпретация релаксационных данных
24. Скалярные взаимодействия между магнитными ядрами и их проявление в спектрах
25. Природа скалярного взаимодействия и величины констант между парами ядер ^1H - ^1H , ^1H - ^{13}C , ^1H - ^{15}N (Зависимость $^1J_{\text{H-X}}$ от магнитного момента ядра X)
26. Знак скалярных констант $^nJ_{\text{H-H}}$ и способы его определения.
27. Связь гомо- и гетероядерных констант со структурными особенностями молекул
28. Геминальные константы $^2J_{\text{H-H}}$ и факторы, влияющие на ее величину.
29. Вицинальные константы $^3J_{\text{H-H}}$ и факторы, влияющие на ее величину.
30. Карплюсовская зависимость $^3J_{\text{H-H}}$ от диэдрального угла θ
31. Зависимость $^3J_{\text{H-H}}$ в этановом фрагменте от электроотрицательностей заместителей
32. Зависимость $^3J_{\text{H-H}}$ в этановом фрагменте от валентных углов
33. Современные модификации Карплюсовской зависимости для $^3J_{\text{H-H}}$.
34. Спектры ЯМР с селективной и широкополосной развязкой от протонов.
35. Методы определения схемы скалярного связывания для простых спиновых систем.
36. Методы спектрального разделения спиновых подсистем.
37. Методы упрощения сложных спектров ЯМР ^1H с помощью их разложения по химическим сдвигам скалярно-связанных ядер.
38. Дальних скалярные константы $^{4-6}J_{\text{H-H}}$ и их зависимость от пространственной ориентации системы ковалентных связей. (Уравнение для $^{4-6}J_{\text{H-H}}$)
39. Специальные методы измерения малых величин дальних скалярных констант
40. Гетероядерные константы $^{1-4}J_{\text{C-H}}$ и их использование в структурном и конформационном анализе органических молекул в растворе

41. Гомоядерные скалярные константы $^{1-3}J_{C-C}$ и их использование в структурном и конформационном анализе органических молекул в растворе
42. Способы измерения величин $^{1-3}J_{C-C}$ и Каплусовская зависимость для $^3J_{C-C}$
43. Измерение скоростей кросс-релаксации σ_{ij} (ЯЭО) для оценки межъядерных расстояний r_{ij} и/или доказательства быстрого (в шкале времени ЯМР) обмена.
44. Приближения изолированной спиновой пары (ISPA) и начальных скоростей (IRA) для устранения эффектов спиновой диффузии при измерении значений ЯЭО.
45. 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.
46. Динамическая шкала спектроскопии ЯМР. Применение ДЯМР для изучения быстрых, промежуточных и медленных процессов в малых и больших молекулах.
47. Методологические и экспериментальные особенности изучения больших биомолекул (белков, полипептидов и др.) в растворе.
48. Методология ЯМР-исследования гормон-рецепторных комплексов на основе спектральных и релаксационных измерений.
49. Принципы использования математической обработки спектральной и релаксационной ЯМР-информации для исследования биохимических реакций.
50. Перспективы и тенденции развития ЯМР-методов в химии, молекулярной биологии, медицине (ЯМР-метабономика), 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.

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 30 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 СПбГУ

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