

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»



Заступник декана
навчальної роботи

[Signature] Наталія УСЕНКО

» *[Signature]* 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ЯМР В НЕОРГАНІЧНІЙ ХІМІЇ
для здобувачів освіти

галузь знань
спеціальність
освітній рівень
освітня програма
вид дисципліни

10 Природничі науки
102- Хімія
магістр
Хімія
вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	2
Кількість кредитів	6
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: професор, Лампека Р.Д.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__р.

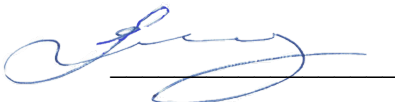
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__р.

КИЇВ – 2022

Розробник: Лампека Ростислав Дмитрович, доктор хімічних наук, професор, кафедра неорганічної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО


В.о. завідувача кафедри неорганічної хімії

 Ростислав ЛАМПЕКА

Протокол № 11 від « 11 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від «29» червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« 01 » липня 2022 року

1. **Метою навчальної дисципліни «ЯМР в неорганічній хімії»** є засвоєння студентами теоретичних основ та отримання практичних навичок при ідентифікації та дослідженні будови і властивостей неорганічних, координаційних та металоорганічних сполук за допомогою сучасних підходів спектроскопії ядерного магнітного резонансу у розчинах та твердому стані..

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

- 2.1 Знати основи спектроскопії ЯМР високого розділення, природу виникнення ССВ та шляхи релаксації збудженої системи ядер.
- 2.2. Вміти інтерпретувати одновимірні спектри ЯМР органічних сполук, аналізувати положення, мультиплетність та напівширина сигналів.
- 2.3. Володіти комп'ютерними програмами, пов'язаними із обробкою СВІ та представленням результатів ЯМР експериментів.
- 2.4. Володіти навичками пошуку необхідної інформації в науковій літературі, наукометричних базах та інтернет - просторі.

3. Анотація навчальної дисципліни

Навчальна дисципліна «ЯМР в неорганічній хімії» дозволяє зрозуміти сучасні підходи до ідентифікації та вивчення неорганічних та координаційних сполук методами одно- та двовимірної ЯМР спектроскопії в розчинах та спектроскопії ЯМР у твердому стані. Розглядаються приклади використання 2D ЯМР спектроскопії при вивченні будови комплексів та їх динамічних перетворень у розчинах. Проводиться огляд ЯМР-спектральних характеристик ядер металів. Розкриваються основи твердотільної ЯМР спектроскопії та її можливості для вивчення конденсованих систем.

4. Завдання (навчальні цілі):

Опанувавши курс, студент повинен знати:

- підходи та принципи застосування двовимірної ЯМР спектроскопії при дослідженні неорганічних та координаційних сполук в розчинах;
- особливості планування ЯМР експерименту для визначення/отримання бажаних параметрів;
- можливості ЯМР спектроскопії для вивчення неорганічних сполук у розчинах на ядрах металів;
- експериментальні підходи та принципи до вивчення неорганічних та координаційних сполук у конденсованій фазі.

Навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК6, ЗК8, ЗК14 та ФК2, ФК4, ФК6, ФК8, ФК9.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1. знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність)		Форма (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання *	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результати навчання			
1.1	Знати теоретичні основи двовимірної ЯМР спектроскопії та основні типи двовимірних ЯМР спектрів при вивченні неорганічних сполук .	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	<i>МКР, ОДР, іспит</i>	15
1.2	Знати основні ЯМР характеристики іонів металів, що можуть бути вивчені методом ЯМР.			10
1.3	Знати теоретичні основи отримання ЯМР спектрів сполук у конденсованому стані.			<i>МКР, ОДР, іспит</i>
2.1	Застосовувати отримані знання щодо отримання ЯМР спектрів при дослідженні неорганічних сполук .	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи		15
2.2	Здійснювати систематизацію та критичний аналіз отриманих ЯМР спектральних даних при ідентифікації неорганічних сполук.			<i>МКР, ОДР</i>
3.1	Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.	Лекції, практичні заняття	<i>ОДР, іспит</i>	10
3.2	Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи		10
4.1	Брати на себе відповідальність за планування, виконання та інтерпретацію експериментів.			<i>МКР, ОДР, іспит</i>
4.2	Уміти вчитись самостійно для безперервного професійного розвитку в області ЯМР спектроскопії неорганічних сполук.	Самостійні роботи		5

* Модульні контрольні роботи (МКР)

*Обов'язкові домашні (самостійні) роботи (ОДР)

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни(код)	1	1	1	2	2	3	3	4	4
	1	2	3	1	2	1	2	1	2
Програмні результати навчання (назва)									
P01. Знати сталі наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+					
P02. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи, теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+	+					
P03. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.				+	+	+	+	+	
P05. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+		+	+	+		
P09. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.	+	+	+	+	+		+	+	
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+			+	+	+	+
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+		+		+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 2.1 – **15/9 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1, РН 4.1, РН4.2 – **15/9 балів**.
3. Усна доповідь з презентацією: РН1.1, РН 1.2, РН 2.1, РН 3.1 РН 4.1 – **15/9 балів**.
3. Практичні заняття № 1–15: РН 1.1,РН 1.2, РН 2.1, РН 3.1, РН 4.1 – **15/9 балів**.

Підсумкове оцінювання (у формі екзамену):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 2.1, РН 2.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: одне теоретичне питання 10 балів, 5 тестових питань на 20 балів і 1 задача на 10 балів.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою 24 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 5 **тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше 9 **тижня** семестру;

Усна доповідь з презентацією виконується протягом семестру, але не пізніше, ніж за 2 **тижні** перед його закінченням;

Персональні завдання для усної доповіді з презентацією студенти отримують не пізніше, як за 6 **тижнів** до закінчення семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59
Зараховано/ Passed	60-100
Не зараховано/ Fail	0-59

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН.**

№	Назва	Кількість годин		
		Лекції	Практична робота	Самостійна робота
ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 1. ДВОВИМІРНА СПЕКТРОСКОПІЯ ЯДЕРНОГО МАГНІТНОГО РЕЗОНАНСУ				
1	Вступ. Довжина імпульсів, що використовується в ЯМР спектроскопії. Поведінка векторів намагніченості збудженої системи магнітних ядер в системі координат, що обертається. Імпульсна послідовність в одновимірному ЯМР експерименті.	2	2	8
2	Вплив прямої та непрямої ССВ взаємодії між магнітними ядрами на інтенсивність сигналів в спектрі ЯМР. Імпульсна послідовність INEPT та NOE як приклади такого впливу.	2	2	8
3	Двовимірний ЯМР експеримент і його відмінності від одновимірного. Час підготовки та розвитку системи збуджених ядер. Детектування сигналу по координаті F1. Графічне представлення двовимірної матриці.	2	2	8
4	Двовимірна J-роздільна ЯМР спектроскопія. Гетероядерна J-роздільна ¹³ C-ЯМР-спектроскопія. Гомоядерна J-роздільна ¹ H-ЯМР-спектроскопія.	2	2	8
5	Двовимірна кореляційна ЯМР-спектроскопія. 2D гетероядерна (H,C)-кореляційна ЯМР-спектроскопія (H,C-COSY). H-Relayed (H,C)-COSY експеримент.	2	2	10
6	Двовимірна гомоядерна (H,H)-кореляційна ЯМР-спектроскопія – H,H-COSY. H-Relayed (H,C)-COSY експеримент. Сучасні варіанти H,H-COSY – TOCSY.	2	2	10
7	Встановлення просторової будови координаційних сполук в розчині. Двовимірна гомоядерна (H,H)-кореляційна ЯМР-спектроскопія, що базується на диполь-дипольній взаємодії між ядрами – H,H-NOESY експеримент.	2	3	10
8	Динамічні процеси в розчинах неорганічних сполук та їх кількісна характеристика. Параметри активації та константи швидкості. Двовимірний варіант ЯМР-спектрального вивчення динамічних процесів EXSY.	24	3	10
9	Модульна контрольна робота 1			

ЗМІСТОВИЙ МОДУЛЬ 2. СПЕКТРИ ЯМР НА ЯДРАХ МЕТАЛІВ ТА СПЕКТРОСКОПІЯ ЯМР НЕОГРАНІЧНИХ СПОЛУК У КОНДЕНСОВАНОМУ СТАНІ				
10	Спектроскопія ЯМР на ядрах, що не відносяться до «зручних» з точки зору їх детектування. Характеристики таких ядер з точки зору чутливості ЯМР-експерименту. Фактори, що дають свій внесок у хімічний зсув важких ядер	2	2	8
11	Сольватація катіонів. Амфифільні та поліелектролітні системи.	2	2	8
12	Дослідження неорганічних сполук на ядрах неметалів – бору, кисню, силіцію, галогенів.	2	3	10
13	Дослідження неорганічних сполук на ядрах металів – лужних та лужноземельних, алюмінію, кадмію, платини та ін. .	2	3	10
14	Основні теоретичні та практичні підходи до ЯМР – спектрального вивчення неорганічних сполук у конденсованому стані – монокристалів та порошків.	4	2	12
15	Модульна контрольна робота 2			

Загальний обсяг **180 год.**, в тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Практичні заняття – **30 год**

Самостійна робота – **120 год.**

9. Рекомендовані джерела

Основні:

1. NMR Spectroscopy, Second Edition. Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry. Edited by Harald Gunther (University of Siegen). John Wiley & Sons, New York, NY. 1995. 581 pp.
2. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс. К.; Ірпінь, ВТФ «Перун», 2007 – 480 с.
3. Claridge T. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry (Volume 19) 1st Edition, Pergamon; 2000, 396 pp.
4. Derome A. Modern NMR Techniques for Chemistry Research. Pergamon Press, 1988 – 280 p.
5. Friebolin H. Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie. VCH, Weinheim – 317 S.
6. Figgis, B.N., Lewis, J. The Magnetic Properties of Transition Metal Complexes. Progress in Inorganic Chemistry; Volume 26, 1979, Wiley

Додаткові:

1. Croasmun W.R, Carlson R.M.K Two Dimensional NMR Spectroscopy. Applications for Chemists and Biochemists. VCH Publishers, 1987 – 511 p.
2. Mason J. Multinuclear NMR. Plenum Press. N.Y.& London, 1987 – 629 p.
3. Laszlo P. NMR of Newly Accessible Nuclei. Academic Press 1983 – V.1 298 p., V2. 435 p.
4. Brett M. Still B.M., Kumar P.J.A, Aldrich-Wright J.R. William S. Price W.S., 195Pt NMR—theory and application. Chem. Soc. Rev., 2007, 36, 665–686
5. Ernsting J.M., Gaemers S., Elsevier C.J., 103Rh NMR spectroscopy and its application to rhodium chemistry. Magn. Reson. Chem. 2004; 42: 721–736
6. Jaz'winski Ja. Advances in understanding and use of NMR scalar couplings. Annual Reports on NMR Spectroscopy, Volume 107, 2022, pp. 185-254
7. Pell A.J., Guido Pintacuda G., Grey C.P. Paramagnetic NMR in solution and the solid state. Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy 111 (2019) 1–271