


Розробник: **Войтенко Зоя Всеволодівна**, д.х.н., проф., професор кафедри органічної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО


Зав. кафедри органічної хімії

 (Хиля В.П.)

Протокол № 12 від "27" березня 2018 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від "25" квітня 2018 року

Голова науково-методичної комісії  (Амірханов В.М.)

"25" квітня 2018 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – розвиток знань аспірантів стосовно теорії та практичних прийомів застосування спектроскопічних резонансних методів дослідження у вивченні хімічної структури та процесів на сучасному високотехнологічному рівні.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

Знати: неорганічну хімію, органічну та фізичну хімію, основи спектроскопічних досліджень, фізичні методи дослідження в хімії на рівні випускника магістратури за спеціальністю «Хімія».

Вміти: інтерпретувати резонансні спектри органічних сполук на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».

Володіти навичками пошуку інформації, її критичної обробки та представлення, застосовувати отримані знання для вирішення прикладних та теоретичних задач у галузі хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках дисципліни «Встановлення структури природних сполук резонансними методами» розглядаються сучасні засади спектроскопічних резонансних методів дослідження складних молекулярних об'єктів та хімічних перетворень. Матеріал курсу сприяє розвитку та закріпленню навичок інтерпретації даних спектрів магнітного резонансу та електронного парамагнітного резонансу з метою одержання інформації про склад, будову та хімічну поведінку сполук.

4. Завдання: сформувані цілісні уявлення про можливості сучасних спектроскопічних резонансних методик як інструменту визначення будови органічних молекул складної будови; сформувані навички розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики; сформувані здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел із використанням новітніх інформаційних і комунікаційних технологій та вміння проводити самостійні досліджень на сучасному рівні; сформувані здатність інтерпретувати дані, отримані при лабораторних експериментах та вимірюваннях і прив'язувати їх до відповідної теорії; сприяти розвитку абстрактного мислення, здатності формувати робочі гіпотези та перевіряти їх на практиці із застосуванням інноваційних технологій в органічній хімії.

5. Результати навчання за дисципліною

<i>Код</i>	<i>Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)</i>	<i>Форми викладання і навчання</i>	<i>Мето- ди оціню- вання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
1.1	Знати сучасні спектроскопічні резонансні методики	<i>лекції, аналітична робота</i>	<i>презен- тація, актив- ність, Пс</i>	15
1.2	Знати принцип роботи і будову спектроскопічних приладів	<i>лекції, практичні,</i>		10
1.3	Знати спектральні характеристики, що лежать в основі ідентифікації молекул	<i>лекції, практичні, аналітична робота</i>		15
2.1	Вміти інтерпретувати дані спектроскопії ЯМР органічних молекул	<i>практичні</i>		10
2.2	Вміти інтерпретувати дані спектроскопії ЕПР органічних молекул	<i>лекції аналітична робота</i>		15

2.3	Вміти раціонально використовувати різних спектральні методи в комплексі для розв'язування конкретних задач	<i>практичні, доповідь, аналітична робота</i>		15
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, що стосується встановлення структури органічних молекул резонансними методами	<i>лекції, практичні, аналітична робота</i>		5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	<i>практичні, аналітична робота</i>		5
4.1	Вміти самостійно зафіксувати, проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються встановлення структури органічних молекул резонансними методами	<i>практичні, аналітична робота</i>		5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації при спектральному дослідженні органічних молекул	<i>практичні, аналітична робота</i>		5

6. В результаті вивчення дисципліни аспірант отримає нові сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі резонансних спектроскопічних методів, які застосовуються в органічній хімії; відпрацює вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції та здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях.

Все це допоможе йому навчитись ініціювати, організувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, пов'язаної із спектроскопічними методами дослідження органічних сполук, що приведе до отримання нових знань та покращення вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, використовуючи при цьому сучасні інноваційні технології при плануванні експерименту, а також зборі, аналізі, обробці та інтерпретації експериментальних даних складних спектроскопічних досліджень органічних молекул.

7. Схема формування оцінки

7.1. Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100 - бальною шкалою. Модульний контроль включає 2 змістові модулі і комплексний підсумковий модуль (іспит). Впродовж навчання передбачається написання 1 модульної контрольної роботи; 2 практичні заняття та одне консультаційне.

- семестрове оцінювання:

презентація референсу останніх розробок, що стосуються реєстрації та інтерпретації резонансних спектрів органічних сполук;
модульна контрольна робота.

- підсумкове оцінювання: іспит.

Максимальна оцінка за семестр: **60 балів**.

Максимальна оцінка на іспиті: **40 балів**.

Максимальна загальна оцінка за курс: **100 балів**.

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Іспит	
	Min. – 24 бали	Max. – 40 балів	Min. – 12 бали	Max. – 20 балів	Min – 24 бали	Max – 40 балів
Активність під час практичних занять	6	10	3	5		
Презентація	12	20	6	10		
Модульна контрольна робота 1	6	10				
Модульна контрольна робота 2			3	5		

Оцінка за презентацію включає в себе: теоретичне наповнення матеріалу (50% від загальної оцінки за презентацію), мультимедійне оформлення (25%), презентація матеріалу (25%).

До іспиту може бути допущений аспірант, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни «Сучасні методи обробки резонансних спектрів органічних сполук» (а саме: активність під час практичних робіт, презентація, написання контрольних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 20 балів (критично-розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

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

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання пропущених занять та перездачі контрольних робіт здійснюються у відповідності до «Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу» від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

8. Структура навчальної дисципліни

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ теми	Назва теми	Кількість годин			
		лекції	практ.	конс.	самост. робота
Змістовий модуль 1.					
Резонансні спектри органічних молекул					
1	Основні діапазони випромінювання електромагнітних хвиль. Сфера застосування спектроскопічних методик. Самостійна робота з літературою.	1			10
2	Принципи, що лежать в основі будови ЕПР спектрометрів. Експериментальні методики реєстрації спектрів ЕПР. Обмеження та труднощі спектроскопічних методик. Самостійна робота з літературою.	2			10
3	Принципи, що лежать в основі будови ЯМР спектрометрів. Експериментальні методики реєстрації спектрів ЯМР. Самостійна робота з літературою.	2			10
4	Двовимірні ЯМР спектроскопія. Кореляційні експерименти. Самостійна робота з літературою.	2	1		10
5	Спектри ЕПР органічних та неорганічних радикалів. Самостійна робота з літературою.	2			10
6	Встановлення будови поліфункціональних органічних молекул за допомогою спектрів ЯМР. Самостійна робота з літературою.	2	1	1	10
	Модульна контрольна робота 1	1			
Змістовий модуль 2.					
Комплексні спектроскопічні дослідження					
7	Джерела інформації про спектральні методи дослідження хімічних сполук. Інтернет-бази спектральних даних. Методологія раціонального пошуку інформації про спектральні методи дослідження хімічних сполук. Самостійна робота з літературою.	1			12
8	Принципи раціонального використання спектральних резонансних методів та комплексне застосування різних методів для розв'язування конкретних задач.	2	1		12
9	Комплексне використання спектральних методик для аналізу сумішей полікомпонентних матеріалів та біомолекул. Самостійна робота з літературою.	2	1	1	12
	Модульна контрольна робота 2	1			
	ВСЬОГО	18	4	2	96

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **18 год.**

Практичні заняття – **4 год.**

Консультації – **2 год.**

Самостійна робота - **96 год.**

9. Рекомендована література

Основна:

1. Спектроскопія ядерного магнітного резонансу / Ю.М. Воловенко, І.В. Комаров, О.В. Туров, В.П. Хиля. Київ: РВЦ "Київський університет", 2016.
2. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс. – Київ., Ірпінь: ВТФ "Перун", 2007. – 480 с.
3. Кларидж Т.Д.В. Сучасні методи ЯМР високого розділення в хімії / Пер. з англ. Турова О.В. Київ 2006
4. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях: Пер. с англ. под ред. К. М. Салихова, М.: Мир, 1990.
5. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М., 1984, 480 с.
6. Корнілов М.Ю., Кутров Г.П. Ядерный магнитный резонанс в химии. Киев, 1985, 200 с.
7. Барглой Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978, 446 с.
8. Бенуэлл К. Основы молекулярной спектроскопии. М., 1985, 379 с.
9. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Л., 1985. 248 с.
10. Д. Браун, А. Флойд, М. Сейнзбери. Спектроскопия органических веществ. М., Мир, 1992, 300 с.
11. Дж. Барлтруп, Дж. Кейл. Возбужденные состояния в органической химии. М., Мир, 1978, 446 с.
12. Э. Дероум. Современные методы ЯМР для химических исследований. М., Мир, 1992, 402 с.

Додаткова:

1. Абрагам А. Ядерный магнетизм. — М.: Издательство иностр. лит., 1963.
2. Корнілов М.Ю., Туров О.В., Борсдорф Р., Клейнпетер Е. Ядерний магнітний резонанс у запитаннях і відповідях. Київ: Вища школа, 1995.
3. Martin, G.E; Zekter, A.S., Two-Dimensional NMR Methods for Establishing Molecular Connectivity; VCH Publishers, Inc: New York, 1988.
4. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. 2006, М.: Мир, 683 с.

а також інтернет-ресурси.