

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра органічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

_____ Н.І. Усенко
« ____ » _____ 2021 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ЯМР СПЕКТРОСКОПІЯ ДЛЯ ПРИРОДНИЧИХ НАУК

**для здобувачів освітньо-наукового рівня
доктор філософії**

галузь знань
спеціальність
освітній рівень
освітньо-наукова програма
вид дисципліни

**10 Природничі науки
102 Хімія
третій, освітньо-науковий
Хімія
вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2021/2022**
Період навчання **2 рік**
Кількість кредитів ECTS **4**
Мова викладання,
навчання та оцінювання **українська**
Форма заключного контролю **-іспит**

Викладач:

Лампека Ростислав Дмитрович, д.х.н., професор кафедри неорганічної хімії

Пролонговано: на 2022-2023 н.р. _____ « ____ » _____ **202** р.

Пролонговано: на 2023-2024 н.р. _____ « ____ » _____ **202** р.

Пролонговано: на 2024-2025 н.р. _____ « ____ » _____ **202** р.

КИЇВ-2021

Розробник: **Лампека Ростислав Дмитрович**, *д.х.н., професор кафедри неорганічної хімії*

Затверджено

«__» _____ 2021 року

Завідувач кафедри неорганічної хімії

_____ М.С.Слободяник
(підпис)

Протокол № __ від “__” _____ 2021 року

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від “20” квітня 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ Роїк О.С.

«__» _____ 2021 року

ВСТУП

1. Мета навчальної дисципліни є поглиблений розвиток знань та вмінь в області спектроскопії ядерного магнітного резонансу у галузі природничих наук. Курс розглядає фундаментальні та спеціальні прикладні аспекти спектроскопії ядерного магнітного резонансу у хімії, біології та медицині.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

Знати: стереохімію органічних та неорганічних сполук, аналітичну хімію, фізичну хімію, хімічні основи життя на рівні випускника магістратури за відповідною спеціалізацією, теоретичні та деякі практичні підвалини окремих розділів фізики та базових знань в області ЯМР.

Вміти: готувати зразки для запису спектрів ЯМР, розшифровувати спектри ЯМР на ядрах ^1H та ^{13}C , пояснювати специфічні параметри сигналів у спектрах різних ядер.

Володіти навичками пошуку необхідної інформації, її критичної обробки та представлення, застосовувати отриману інформацію для планування ЯМР експерименту для вирішення прикладних задач у галузі тієї чи іншої природничої науки.

3. Анотація навчальної дисципліни. Дисципліна «ЯМР-спектроскопія для природничих наук» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. Вона забезпечує особистісний і професійний розвиток аспіранта та спрямована на формування ефективного дослідника і викладача вищої школи, здатного до використання сучасних методів дослідження природних об'єктів та передачі знань. В курсі розглядається явище магнітного резонансу, одержання ЯМР спектрів на різних ядрах та інформація, яка може бути одержана зі спектрів. В рамках курсу планується поглибити системні знання з багатовимірної ЯМР спектроскопії, спектроскопії твердого тіла та сучасних ЯМР спектральних методик. Суттєве значення при читанні курсу планується приділити плануванню ЯМР експерименту виходячи із наявної перед дослідником задачі/проблеми.

4. Завдання (навчальні цілі): в результаті вивчення навчальної дисципліни забезпечити підготовку аспірантів до проведення самостійної дослідницької роботи в хімії, біології, медицині, зокрема розуміння переваг багатовимірних ЯМР експериментів для вирішення нагальних теоретичних та прикладних задач, вміння визначення необхідності проведення 2х- або 3х-вимірних ЯМР експериментів та планування їх реалізації, вміння вірно аналізувати отримані ЯМР дані та робити коректні висновки, сприяти розвитку абстрактного мислення, здатності формувати робочі гіпотези та перевіряти їх на практиці із застосуванням новітніх тенденцій спектроскопії ЯМР; розвиток здатності до опанування нових досягнень в галузі фізичних методів дослідження..

5. Результати навчання за дисципліною:

	Результат навчання (1.знати;2.вміти;3.комунікація;4.автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати поведінку векторів намагніченості при дії одного імпульсу різної довжини і при дії декількох послідовних імпульсів різної довжини і різного напрямку. Подвійний резонанс з точки зору поведінки векторів намагніченості. Методики SPI (SPT), ширококутовий декаплінг та ін	Лекції, самостійна робота	ОДР, ПІ	15
1.2	Знати основні етапи двовимірного ЯМР-експерименту. Час розвитку системи. Виникнення двовимірного спектру та способи його зображення. Переваги та недоліки 2М-експерименту.	Лекції, самостійна робота	ОДР, ПІ	15
1.3	Знання впливу релаксаційних процесів на характер 2М-ЯМР спектру. Крок у зміні часу розвитку системи. Роздільна здатність у 2М-експерименті.	Лекції, самостійна робота	ОДР, ПІ	15
1.4	J-кореляційні та δ-кореляційні двовимірні ЯМР-спектри. Тривалість реєстрації 2М-ЯМР спектру. Поняття про 3х-вимірний ЯМР експеримент	Лекції, самостійна робота	ОДР, ПІ	15
2.1	Визначення факторів, що впливають на необхідність використання двовимірної ЯМР-спектроскопії для вирішення поставлених перед науковцем завдань. Планування 2М ЯМР-експерименту.	Лекції, практичні роботи, самостійна робота	ОДР, ПІ	5
2.2	Аналіз даних двовимірних ЯМР спектрів. Коректне віднесення усіх сигналів спектрів. Врахування артефактів, що обумовлені фізичними та математичними причинами. Необхідність повторного експерименту.	Лекції, практичні роботи, самостійна робота	ОДР, ПІ	5
2.3	Набуття навичок усної і письмової презентації результатів власного наукового дослідження; збір і критичний аналіз наукової літератури за заданою темою	Практичні роботи, самостійна робота, презентація	ОДР	5
3.1	Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	Практичні роботи, самостійна робота, презентація	Доповідь по роботі; виконання творчих робіт, презентація	20

3.2	Вільне володіння науковою термінологією з метою вільного професійного спілкування з колегами щодо питань у галузі інновацій в аналітичній хімії, а також тих, що стосуються сфери наукових та експертних знань	Практичні роботи, самостійна робота, презентація	Доповідь по роботі; виконання творчих робіт, презентація	5
4.1	Дотримання правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації	Лекції, самостійна робота	ОДР, ПІ	5
4.2	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Самостійна робота	ОДР, ПІ	5

* групові письмові тематичні контрольні роботи (ПТК)
обов'язкові домашні (самостійні) роботи (ОДР)
письмовий іспит (ПІ)

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

В результаті вивчення дисципліни аспірант отримає нові сучасні концептуальні та методологічні знання в галузі спектроскопії ядерного магнітного резонансу; відпрацює вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції і розробки та здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях.

Вищесказане створить основу для інспірування, організації та проведення комплексних досліджень таким потужним методом, як ЯМР, які приводять до отримання нових знань та відшліфувати вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, використовуючи при цьому сучасні розробки в теорії та практиці ЯМР при плануванні експерименту, а також зборі, аналізі, обробці та інтерпретації експериментальних даних складних досліджень в різних галузях природничих наук.

Результати навчання дисципліни(код)	Програмні результати навчання (назва)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Знання												
Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань.	+	+	+	+	+	+				+	+	
Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+		+	
Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин.	+	+	+	+	+	+		+		+		
Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку	+	+	+	+	+	+		+	+			
Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів.	+	+	+	+	+	+	+	+		+		
Знання основних принципів термодинаміки та хімічної кінетики, здатність до їх застосування	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+	

для рішення практичних задач.											
Уміння											
Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї.	+	+	+	+	+	+	+		+	+	+
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей.	+	+	+	+	+	+		+		+	+
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.	+	+		+	+	+	+	+			+
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову доброчесність.	+	+	+	+	+	+	+	+			+
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+	+	+	+	+		+	+	+	
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.					+	+		+		+	
Готувати розчини та реагенти, планувати та здійснювати хімічні експерименти.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+		+
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+	+	+	+	+	+	+	+	+		
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.					+	+	+		+	+	
Комунікація											
Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	+	+	+		+	+		+	+		+
Вміння коректно використовувати мовні засоби в професійній діяльності залежно від мети спілкування.								+	+		
Вміння відображати результати своїх наукових досліджень у письмовому вигляді.					+	+	+	+	+		
Здатність до презентації результатів своїх досліджень.						+	+	+	+		+
Здатність працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної					+	+	+	+	+	+	+

взаємодії.											
Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.					+	+	+		+		
Автономія та відповідальність											
Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.										+	+
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.										+	+
Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.								+		+	+
Здатність приймати обґрунтовані рішення та рухатися до спільної мети.							+	+			+

7. Схема формування оцінки

7.1. Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100-бальною шкалою. Модульний контроль включає 1 змістовний модуль і комплексний підсумковий модуль (іспит). Впродовж навчання передбачається 3 практичні заняття.

- семестрове оцінювання

Модульна контрольна робота по темі «Подвійний та/або потрійний резонанс в ЯМР спектроскопії»

Презентація виконаного ЯМР експерименту в області власної наукової теми

- 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):

Види робіт	Змістовий модуль 1 (ЗМ1)	
	Min. – 36 балів	Max. – 60 балів
МКР по темі «Подвійний та/або потрійний резонанс в ЯМР спектроскопії»	12	20
Презентація виконаного ЯМР експерименту в області власної наукової теми	24	40
Загальна сума	36	60

Оцінка за презентацію включає в себе: теоретичне наповнення матеріалу – максимум 20 балів / мінімум 12 балів, мультимедійне оформлення – максимум 10 балів / мінімум 6 балів, презентація матеріалу – максимуму 10 балів / мінімум 6 балів. Захисти проводяться на протязі трьох останніх тижнів занять.

На передостанньому тижні занять проводиться тематична консультація, на якій обговорюються проблемні моменти, що можуть виникнути у аспіранта при підготовці іспиту.

При розрахунку ПО= ЗМ1 + КПМ:

	<i>ЗМ1</i>	<i>Іспит* (ПІ)</i>	Підсумкова оцінка (ПО)
Максимум	60	40	100
Мінімум	36	24	60
Критичний мінімум	20	40	60

** - Тематики для самостійного опрацювання також виносяться на іспит.*

Для здобувачів, які набрали сумарно меншу кількість балів ніж критично-розрахунковий мінімум – 20 балів для одержання допуску до іспиту обов'язково слід відпрацювати всі заборгованості.

У випадку відсутності здобувача з поважних причин відпрацювання та передачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

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%

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ.

НАВЧАЛЬНО-ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		Лекції	Практ. заняття + конс.	Самост. робота
Двовимірна ЯМР-спектроскопія				
1-2	Створення умов для ЯМР. Сумарна намагніченість та поведінка її вектора у випадку прикладання різноманітних імпульсів. Проблеми, що виникають при вирішенні задач методом ЯМР. Багатоімпульсні послідовності. Подвійний та потрійний резонанси у ЯМР спектроскопії та їх впливи на спектри ЯМР	4		5
3-4	Виміри у ЯМР-спектроскопії. Відмінності у методології запису одно- та двовимірних спектрів ЯМР. Фізичні та математичні основи виникнення двовимірного спектру. Роздільна здатність у 2М ЯМР-спектроскопії. Вплив релаксаційних процесів та кількості експериментів на роздільну здатність. Обмеження та недоліки 2М ЯМР-спектрів	2		13
5	Фізична суть та використання J-кореляційної ЯМР-спектроскопії, гомо- та гетероядерний варіант. Сучасні підходи до спрощення спектрів ПМР	2		10

	(PSYCHE)			
6	Фізична суть та використання δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії, гомоядерний варіант. COSY, Relaed COSY, TOCSY та ін. Використання методики PSYCHE для інтерпретації двовимірних спектрів ЯМР	2		15
7	Фізична суть та використання δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії, що базується на непрямій сін-спіновій взаємодії, гетероядерний варіант. Використання методики PSYCHE в гетероядерній δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії	2	2	20
8	Фізична суть та використання δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії, що базується на ефекті ядерно-ядерного ефекту Оверхаузера. , гетероядерний варіант. Методики NOESY, ROESY.	2	2	15
9	Динамічні процеси в органічних та координаційних сполуках, що можуть відслідковуватися у шкалі часу ЯМР. Двовимірний варіант вивчення обмінних процесів EXSY	2	2	10
10	Використання ЯМР в аналітичній хімії. Визначення коефіцієнтів дифузії речовин в розчинах сумішей. Методики DOSY та qNMR.	2		10
	ВСЬОГО	18	6	96

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

Лекції – **18 год.**

Практичні заняття – **4 год.**

Консультації – **2 год.**

Самостійна робота – **96 год.**

9.Рекомендовані джерела

Основна:

1. Х.Гюнтер, Введение в курс спектроскопии ЯМР, М., Мир, 1984
2. Ю.М.Воловенко, О.В.Туров, Ядерный магнитный резонанс. Київ, Перун, 2001
3. H.Friebolin, Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie, VCH, 1988.
4. Тимоти Д.В. Клари́дж Современные методики ЯМР высокого разрешения в химии. Киев, 2006.
5. Комаров І.В., Туров О.В. Практикум зі спектроскопії ядерного магнітного резонансу, ВПЦ «Київський університет», 2009

Додаткова:

1. Р.Эрнст, Дж.Боденхаузен, А.Бокаун. ЯМР в одном и двух измерениях, Москва, «Мир», 1990
2. W.R.Croasmun, R.M.K.Carlson, Two-Dimensional NMR Spectroscopy. Application for Chemists and Biochemists, VCH, 1988
3. J.K.M.Sanders, B.K.Hunter, Modern NMR Specnroscopy, Oxford University Press, 1997
4. A.E.Derome, Modern NMR Techniques for Chemistry Research
5. Сайт <http://chem.ch.huji.ac.il/nmr/techniques/other/diff/diff.html>
6. M. Foroozandeh, R.W. Adams, M.Nilsson, and G.A. Morris, Ultrahigh-Resolution Total Correlation NMR Spectroscopy, J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 11867–11869 (і цитована там

література)

9. Рекомендована література:

Основна

1. Григоренко, О. О. Сучасні методи органічного синтезу / О. О. Григоренко, О. В. Шабликіна. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2021. – 572 с.
2. Пивоваренко В. Г. Механізми органічних реакцій у розчинах / В. Г. Пивоваренко – К. : ВПЦ "Київський університет", 2019. – 303 с.
3. Горічко М. В. Органічна хімія. Реакції карбонільних сполук / М. В. Горічко, В. Г. Пивоваренко. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2012. – 352 с.
4. Григоренко О. О. Органічна хімія в реакціях / О. О. Григоренко. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2013. – 114 с.
5. Wermuth C. The practice of medicinal chemistry, 4th ed. / C. Wermuth, D. Aldous, P. Raboisson, D. Rognan. – Academic press, 2015. – 880 pp.

Додаткова:

1. Ковтуненко В. О. Вибрані розділи нейрохімії / В. О. Ковтуненко. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2019. – 146 с.
2. Григоренко, О. О. Літературний пошук в органічній хімії / О. О. Григоренко, О. В. Шабликіна. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2020. – 572 с.
3. Сайт Food and drug administration (США), www.fda.gov
4. Сайт Reaxys, www.reaxys.com
5. Сайт колекції тотальних синтезів проф. Г. Рейха, <https://organicchemistrydata.org/hansreich/resources/syntheses>
6. Блог «In the pipeline», <https://blogs.sciencemag.org/pipeline/>
7. Блог «Practical fragments», <http://practicalfragments.blogspot.com/>