

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет
Кафедра неорганічної хімії



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ЯМР-спектроскопія для природничих наук

для здобувачів третього освітньо-наукового рівня
доктор філософії

Для всіх спеціальностей, ліцензованих у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка для третього (освітньо-наукового) рівня

Вид дисципліни вибіркова

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

Викладач: д.х.н., проф. Лампека Р.Д.

Пролонговано: на **2022/2023** н.р. Н.Усенко (« 13 » 05 2022 р.

Пролонговано: на **2023/2024** н.р. Н.Усенко (« 20 » 05 2023 р.

Пролонговано: на **2024/2025** н.р. () (« » 202 р.

КИЇВ – 2021

Розробник:

Лампека Ростислав Дмитрович, доктор хімічних наук, професор кафедри неорганічної хімії хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка

ЗАТВЕРДЖЕНО

зав. кафедри неорганічної хімії

 Микола СЛОБОДЯНИК

Протокол № 10 від «04» березня 2021 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від «20» __ 04__ 2021 р.

Голова науково-методичної комісії

Олександр РОЇК

«20» __ 04__ 2021 року

ВСТУП

1. Мета 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 та біології.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знати неорганічну, органічну хімію, стереохімію, окремі розділи фізики та базові знання в області ЯМР на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
2. Вміти визначати необхідність проведення двовимірного ЯМР-експерименту та спланувати його реалізацію та вірно проаналізувати результати.
3. Володіти навичками пошуку інформації в науковій літературі.
4. Володіти елементарними навичками продукування нових ідей, мати здатність до творчого (креативного) мислення

3. Анотація навчальної дисципліни: це розширений курс спектроскопії ЯМР, який надає поглиблений рівень знань для більш повного та усвідомленого використання спектроскопії ЯМР у галузі органічної, неорганічної, аналітичної хімії, біохімії, молекулярної біології і критично відслідковувати наукові публікації у цих галузях наук. Курс концентрується, в першу чергу, на наступних темах – використання подвійного резонансу для спрощення спектрів, для виявлення прямої та непрямої спин-спінової взаємодії, а також для проведення експериментів з двовимірної спектроскопії ЯМР з метою вивчення різноманітних процеси, що відбуваються у розчинах.

4. Завдання:

Навчальний курс забезпечує загальнонаукову підготовку майбутнього доктора філософії, спрямовану на формування системного наукового світогляду, професійної етики та загального культурного кругозору, розвинути навички планування та інтерпретації складних багатовимірних експериментів та здатності інтерпретувати дані, отримані при лабораторних експериментах та вимірюваннях і прив'язувати їх до відповідної теорії; сприяти розвиненню здатності розв'язувати комплексні проблеми в галузі хімії та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань.

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>Методи оцінювання (ПтК – поточний, ПсК – підсумковий контроль)</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
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), широкосмуговий декаплінг та ін	Лекції, самостійна робота	ОДР, ПЕ	10
1.2	Знати основні відрізки двовимірного ЯМР-експерименту.	Лекції, самостійна	ОДР, ПЕ	10

	Час розвитку системи. Виникнення двовимірного спектру та способи його зображення. Переваги та недоліки 2М-експерименту.	робота		
1.3	Знати вплив на характер 2М-ЯМР спектру релаксаційних процесів. Крок у зміні часу розвитку системи. Роздільна здатність у 2М-експерименті.	Лекції, самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10
1.4	Знати J-кореляційні та δ -кореляційні двовимірні ЯМР-спектри. Тривалість реєстрації 2М-ЯМР спектру	Лекції, самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10
2.1	Вміти визначати фактори, що впливають на необхідність використання двовимірної ЯМР-спектроскопії для вирішення поставлених перед науковцем завдань. Планування 2М ЯМР-експерименту.	Лекції, практичні роботи, самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10
2.2	Вміти аналізувати дані двовимірних ЯМР спектрів. Коректне віднесення усіх сигналів спектрів. Врахування артефактів, що обумовлені фізичними та математичними причинами. Необхідність повторного експерименту.	Лекції, практичні роботи, самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10
3.1	Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	Лекції, практична та самостійна робота	<i>Доповідь по роботі; виконання творчих робіт, презентація</i>	10
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, практична та самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10
4.1	Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища	Лекції, самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10
4.2	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Самостійна робота	<i>ОДР, ПЕ</i>	10

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

6. В результаті вивчення дисципліни аспірант отримає нові сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі аналітичної 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, організовувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності в аналітичній хімії, які приводять до отримання нових знань та відшліфувати вміння кваліфіковано відобразити 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 аналітичних досліджень.

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 написання 1 модульної контрольної роботи; 2 практичні заняття та одне консультаційне.

- семестрове оцінювання

презентація референсу останніх досліджень у галузі **ЯМР-спектроскопії** (Домашня (самостійна) 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:

	<i>Домашня (самостійна) робота 1</i>		<i>Домашня (самостійна) робота 2</i>		<i>Домашня (самостійна) робота 3</i>	
Виконання домашньої самостійної роботи	<i>Min. – 12 балів</i>	<i>Max. – 20 балів</i>	<i>Min. – 12 балів</i>	<i>Max. – 20 балів</i>	<i>Min. – 12 балів</i>	<i>Max. – 20 балів</i>

Оцінка за презентацію референсу (за результатами пошуку) 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. *Захист проводиться на останньому тижні занять.*

На передостанньому тижні занять проводиться тематична консультація, на якій обговорюються проблемні моменти, що можуть виникнути у аспіранта при підготовці реферансу та/або презентації.

При простому розрахунку ПО = ЗМ1 + КІПМ отримаємо:

	ЗМ1	іспит	Підсумкова оцінка (ПО)
Максимум	60	40	100
Мінімум	36	24	60
Критичний мінімум	20	40	60

Теми 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 та написати модульну контрольну роботу мінімум на 15 балів із 20.

У випадку відсутності здобувача з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР 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

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 ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва лекцій	Кількість годин		
		Лекції	Практ. заняття	Самост. робота
<i>Двовимірна ЯМР-спектроскопія</i>				
1	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 (Самостійна робота з літературою)	4		6
2	Виміри у ЯМР-спектроскопії. Відмінності у методології запису одно- та двовимірних спектрів ЯМР. Фізичні та математичні основи виникнення двовимірного спектру. Підходи до зображення двовимірних спектрів. Роздільна здатність у 2М ЯМР-спектроскопії. Вплив релаксаційних процесів та кількості експериментів на роздільну здатність. Обмеження та недоліки 2М ЯМР-спектрів(Самостійна робота з літературою)	4		10
3	Фізична суть та використання J-кореляційної ЯМР-спектроскопії, гомо- та гетероядерний варіант.	2		10
4	Фізична суть та використання δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії, гомоядерний варіант. COSY, Relaed COSY, TOCSY та ін.. (Самостійна робота з літературою)	2		20
5	Фізична суть та використання δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії, що базується на непрямій сін-спіновій взаємодії, гетероядерний варіант. (Самостійна робота з літературою)	2	2	20

6	Фізична суть та використання δ -кореляційної ЯМР-спектроскопії, що базується на ефекті ядерно-ядерного ефекту Оверхаузера. , гетероядерний варіант. Методики NOESY, ROESY. (Самостійна робота з літературою)	2	2	20
7	Динамічні процеси в органічних та координаційних сполуках, що можуть відслідковуватися у шкалі часу ЯМР. Двовимірний варіант вивчення обмінних процесів EXSY. (Самостійна робота з літературою)	2		10
	ВСЬОГО	18	4	96

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

Лекції – **18** год.

Практичні заняття – **4** год.

Консультації – **2** год.

Самостійна робота – **96** год.

9. Рекомендована література.

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. Кларидж Современные методики ЯМР высокого разрешения в химии. Киев, 2006.

Додаткова:

1. Р.Эрнст, Дж.Боденхаузен, А.Бокаун. ЯМР в лдном и двух измерениях, Москва, «Мир», 1990
2. W.R.Croasmun, R.M.K.Carlson, Two-Dimensional NMR Spectroscopy. Application for Cgrmists and Biochemists, VCH, 1988
3. J.K.M.Sanders, B.K.Hunter, Modern NMR Specnroscopy, Oxford University Press, 1997