

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

Наталія УСЕНКО

11 » 06 2024 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ЯМР В НЕОРГАНІЧНІЙ ХІМІЇ

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	заочна
Навчальний рік	2024/2025
Семестр	<u>2</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: д.х.н., проф., професор, Лампека Р.Д.

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

КИЇВ - 2024

Розробник:

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

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри неорганічної хімії

 Ростислав ЛАМПЕКА

Протокол № 8 від « 13 » березня 2024 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 9 » квітня 2024 року № 8

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« 9 » квітня 2024 року

1. Мета дисципліни – 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 або вибору 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.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (другий(магістерський) рівень вищої освіти (сьомий рівень НРК України), галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 «Хімія») дисципліна забезпечує набуття студентами таких *компетентностей*:

Інтегральної:

Здатність розв'язувати складні задачі і проблеми у галузі хімії або у процесі навчання, що передбачає проведення досліджень, здійснення інновацій та характеризується невизначеністю умов і вимог

Загальних:

ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК 10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою як усно, так і письмово.

Фахових:

ФК 2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати 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 та розуміти основні властивості «нетрадиційних» в спектроскопії ЯМР ядер і їх вплив на характеристики відповідного ЯМР спектра.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Дистанційні модульні контрольні роботи, іспит	10
1.2. Знати теоретичні основи двовимірної ЯМР спектроскопії та основні типи двовимірних ЯМР спектрів при вивченні неорганічних сполук .	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Дистанційні модульні контрольні роботи, іспит, перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
1.3. Знати та розуміти основні підходи до вивчення динамічних процесів у розчинах координаційних сполук методом ЯМР.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури	Дистанційні модульні контрольні роботи, іспит, перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
1.4. Знати теоретичні основи отримання ЯМР спектрів сполук у конденсованому стані.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання огляду літератури за темою.	15
2.1. Вміти здійснювати літературних пошук, проводити систематизацію та критичний аналіз отриманих ЯМР спектральних даних, презентувати результати свого дослідження.	Лекції, самостійне опрацювання рекомендованої літератури практичні заняття.	Підготовка та презентація огляду літератури за наданою темою; перевірка завдань самостійної роботи.	10
2.2. Вміти використовувати набуті знання для планування та постановки ЯМР-експериментів при вивченні неорганічних сполук.	Лекції, самостійне опрацювання рекомендованої літератури практичні заняття	Практичні заняття	15
3.1. Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.	Практичні заняття	Підготовка та презентація огляду літератури за наданою темою	10
4.1. Вміти самостійно працювати з науковою та	Самостійна робота	Підготовка та презентація огляду літератури за наданою	10

навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнювати науково-технічну інформацію.		темою	
---	--	-------	--

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни							
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	3.1	4.1
ПРН3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+		+	+	+	+	
ПРН4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.				+	+		+	
ПРН6. Знати методологію та організації наукового дослідження					+	+	+	
ПРН10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.					+	+		

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:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 (дистанційно) – РН 1.1-1.2 – 20 балів/12 балів
2. Огляд літератури за заданою темою (дистанційно) – РН 2.1, 3.1; 4.1 – 10 балів/6 балів
3. Модульна контрольна робота 2 – РН 1.3 – РН 1.4 – 10 балів/6 балів
4. Оцінювання роботи на практичних заняттях – РН 2.1; 2.2; 3.1 – 20 балів/12 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Підсумкова оцінка з освітнього компоненту в цілому: підсумковою формою контролю за яким встановлено іспит визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання (дистанційно та під час проведення аудиторних занять; оцінки нижче мінімального рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час іспиту.

Форма проведення іспиту - письмово-усна, вид письмових завдань – комбіновані тестові та відкриті питання. Результатами навчання, які оцінюються під час проведення іспиту, є РН 1.1-1.4. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час іспиту, становить 40 балів за 100 бальною шкалою. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Обов'язковою умовою допуску до іспиту є написання двох модульних контрольних робіт, виконання двох практичних робіт та написання огляду літератури за заданою темою. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Модульні контрольні роботи 1 і 2 проводяться дистанційно, оцінювання практичних робіт здійснюється протягом проведення аудиторного навчання. Огляд літератури передбачає, що студенти мають провести аналіз літератури за заданою темою, визначити переваги та недоліки наведених методик ЯМР досліджень, запропонувати методи підтвердження складу, властивостей та будови обраного класу неорганічних сполук та захистити узагальнений матеріал.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / Nationalgrade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і практичних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		Лекції	Практичні роботи	Самостійна робота
«ЯМР спектральні підходи до вивчення неорганічних сполук»				
1	Лекція. Типи ЯМР спектрів, що використовуються при дослідженні хімічних сполук та їх сумішей у розчині. Основні характеристики ядер, які впливають на можливість їх детектування методом ЯМР. Прогнозування чутливості експерименту та напівширини сигналу. Характеристики сполук, які можна отримати за допомогою ЯМР. Багатоімпульсні послідовності при отриманні ЯМР спектру. Динамічні процеси, що відбуваються в розчинах неорганічних сполук.	2		6
2	Самостійна робота. Поведінка векторів намагніченості при дії на них імпульсів різної довжини (тривалості) і їх відображення в спектрі. Час затримки між імпульсами в багатоімпульсних послідовностях. Важливість точного налаштування тривалості імпульсів для отримання якісних ЯМР спектрів.			8
3	Самостійна робота. Час релаксації ядер після їх збудження електромагнітною хвилею. Поздовжній та поперечний час релаксації і внутрішні фактори системи, що вивчається на величини часу релаксації.			8
4	Самостійна робота. Основні підходи і вимоги до устаткування, а також підготовки зразка до планування ЯМР експерименту і до одержання високоінформативного спектра. Розв'язання проблемних задач, що пов'язані з ЯМР спектрами неорганічних сполук.			8
5	Лекція. Різниця між одно- та багатовимірною спектроскопією ЯМР, переваги та недоліки останньої. Типи двовимірних ЯМР спектрів – J-кореляційна, δ -кореляційна, NOESY, EXSY. Нові сучасні підходи до вивчення хімічних сполук у розчині – дифузна ЯМР спектроскопія (DOSY) та ін. Основи спектроскопії ЯМР у конденсованому стані.	2		8
6	Самостійна робота. Градієнтний імпульс та його використання в ЯМР спектральних дослідженнях.			8
7	Самостійна робота. Використання одно- та двовимірної спектроскопії ЯМР для неорганічних сполук з використанням ядер ^{31}P , ^{11}B , ^{15}N . Теоретичні передумови таких досліджень - характеристики ядер та спин-спінова взаємодія.			8
8	Практична робота 1: Розв'язання проблемних задач, що пов'язані з ЯМР спектрами неорганічних сполук з використанням ядер ^{31}P , ^{11}B , ^{15}N .		2	16
9	Практична робота 2: Розв'язання проблемних задач, що пов'язані з ЯМР спектрами неорганічних сполук з використанням ядер ^{195}Pt , ^{183}W , ^{27}Al та ін. металів.		2	16
10	Самостійна робота: ЯМР спектральне дослідження неорганічних сполук, що містять неспарені електрони			8
11	Підготовка та захист огляду літератури за наданою темою. Підсумкова контрольна робота			18

Загальний обсяг 120 год, в тому числі:

Лекції – 4 год.

Практичні роботи – 4 год.

Консультації – 0 год.

Самостійна робота – 112 год.

9. Рекомендовані джерела

Основні:

1. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс. К.; Ірпінь, ВТФ «Перун», 2007 – 480 с.
2. Paul S.Pregosin. NMR in Organometallic Chemistry. Wiley-VCH, 2012, 392 p.
3. Jaz'winski Ja. Advances in understanding and use of NMR scalar couplings. Annual Reports on NMR Spectroscopy, Volume 107, 2022, pp. 185-254
4. Jonathan Ainsley Iggo and Konstantin V. Luzyanin. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102688-5.00002-7>
5. 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 p.

Додаткові:

1. Jennifer N. Maki and Nikolaus M. Loening Measuring Molecular Motion: Using NMR Spectroscopy to Study Translational Diffusion, doi: 10.1021/bk-2007-0969.ch012
2. Holly C. Gaede NMR Exchange Spectroscopy, doi: 10.1021/bk-2007-0969.ch013
3. Fadwa Odeh and Yuzhou Li, Dynamic NMR in an Advanced Laboratory, doi: 10.1021/bk-2007-0969.ch014
4. Chip Nataro, William R. McNamara, and Annalese F. Maddox When Nuclei Cannot Give 100°C, doi: 10.1021/bk-2007-0969.ch018
5. Martin Minelli, Using ^{95}Mo NMR Spectroscopy in the Synthesis and Characterization of $\text{Mo}(\text{C})_6\text{-n}(\text{CNR})_n$ Complexes, doi: 10.1021/bk-2007-0969.ch019
6. 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
7. Luca Ronconi, Peter J. Sadler. Applications of heteronuclear NMR spectroscopy in biological and medicinal inorganic chemistry, Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy 111 (2019) 1–271