
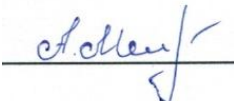


ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ИНЖЕНЕРНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры технической химии и ма-
териаловедения протокол № 29 от 21.06.2019 г.

Зав. кафедрой  /Мухамедзянова А.А.

Согласовано:
Председатель УМК факультета

 / Мельникова А.Я.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«ЯМР-спектроскопия в анализе материалов»


Часть, формируемая участниками образовательных отношений – Б.1.В.04

программа магистратуры

Направление подготовки
04.04.02 – Химия, физика и механика материалов


Направленность (профиль) подготовки
Современные материалы для медицины и техники

квалификация
магистр

Разработчик (составитель) доцент, к.х.н.	 / Мурзагулова Э.И.
---	---

Для приема 2019 г.

Уфа 2020 г.

Составитель / составители: к.х.н., доцент кафедры ТХМ  / Мурзагулова Э.И.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры технической химии и материаловедения протокол от «21» июня 2019 г. № 29.

Заведующий кафедрой



/ Мухамедзянова А.А.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры обновлены базы данных и программное обеспечение, протокол № 13 от «21» апреля 2020 г.

Заведующий кафедрой



/ Мухамедзянова А.А.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____

_____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____ / _____ Ф.И.О./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____

_____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____ / _____ Ф.И.О./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры _____

_____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 20 _ г.

Заведующий кафедрой

_____ / _____ Ф.И.О./

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	7
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	7
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	7
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	10
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	16
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	16
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	16
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	17

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Профессиональные навыки	ПК-9 – готовность к использованию современных методов анализа для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов, научному и методологическому обоснованию схем комплексной аттестации продуктов и технологических схем их получения	ПК-9.1. Знать современные методы анализа для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов и их теоретические основы	<p>Знать: Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество. Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса. Спектроскопию ЯМР¹³C. Спектры ЯМР¹³C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР¹³C без подавления по протонам, спектры ЯМР¹³C с частичным подавлением протонов. Применение ЯМР¹³C спектров для установки структуры органических соединений. Технику и методику снятия спектров ЯМР. Требования к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров.</p>
		ПК-9.2. Уметь применять полученные теоретические знания для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов	<p>Уметь: Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений. Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя</p>

			<p>теоретические и практические знания.</p> <p>Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹H органических соединений, находить параметры спектров ПМР- X.C. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹³C и применять их для установления структуры органических соединений.</p> <p>Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР</p>
		<p>ПК-9.3. Владеть навыками научного и методологического обоснования схем комплексной аттестации продуктов и технологических схем их получения</p>	<p>Владеть:</p> <p>Навыками установления структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p> <p>Владеть методами и приемами расшифровки спектров.</p> <p>Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (X.C.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.</p> <p>Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений.</p> <p>Навыками расшифровки спектров ЯМР¹H органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- X.C. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.</p> <p>Навыками использования полученных знаний по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю</p>

			и условиям снятия ЯМР-спектров. в установлении структуры соединений полученных в ходе эксперимента.
--	--	--	---

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «ЯМР-спектроскопия в анализе материалов» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, образовательной программы подготовки магистров по направлению 04.04.02 «Химия, физика и механика материалов», направленности подготовки «Современные материалы для техники и медицины».

Дисциплина изучается на 1 курсе во 2 семестре.

Целями освоения дисциплины «ЯМР-спектроскопия в анализе материалов» являются приобретение выпускником знаний в области классических и современных методов ЯМР-спектроскопии для установления структуры органических соединений, а также навыков их применения. Выпускник должен получить знания в области современных подходов к установлению структуры органических веществ (определения степени замещения у атомов углерода, расшифровки данных Н-Н, С-Н и С-С-корреляций).

Дисциплина «ЯМР-спектроскопия в анализе материалов» находится в логической взаимосвязи, прежде всего, с обязательной частью образовательной программы бакалавриата по направлению 04.03.02 «Химия, физика и механика материалов», поскольку вопросы, касающиеся актуальных проблем химии в области основного органического синтеза, в том числе полимерных материалов и материаловедения, материалов для фарминдустрии не могут быть качественно решены без знания и применения современных физико-химических методов анализа. Знание основных свойств органических соединений позволяет прогнозировать структуру, получающихся в ходе синтеза веществ, что, в свою очередь облегчает интерпретацию спектральных данных. Спектральные характеристики – основной инструмент при установлении структуры синтезируемых сложных органических соединений. Грамотное, профессиональное применение полученных знаний в области ЯМР-спектроскопии позволяет решать самые актуальные задачи современной химии. При освоении данной дисциплины активно используются знания о возможностях использования современных информационных технологий в образовании и науке, приобретенная способность квалифицированного владения всеми видами научного общения (устного и письменного).

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин:

Органическая химия, Методы и средства определения химического состава и структуры материалов, Современная физическая химия, Физика.

Дисциплина «ЯМР-спектроскопия в анализе материалов», в свою очередь, необходима для освоения таких дисциплин, как «Асимметрический синтез и катализ - современный метод в производстве медицинских субстанций», «Стереохимия органических соединений», «Фармацевтический анализ и система контроля качества медицинских материалов и лекарственных средств», «Синтетические полимеры для реконструктивной медицины», «Органические реакции на полимерных субстратах», а также практик «Научно-исследовательская работа», «Преддипломная практика», при «Подготовке к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы».

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

ПК-9 – Готовность к использованию современных методов анализа для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов, научному и методологическому обоснованию схем комплексной аттестации продуктов и технологических схем их получения

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
ПК-9.1. Знать современные методы анализа для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов и их теоретические основы	<p>Знать:</p> <p>Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество.</p> <p>Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений.</p> <p>Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса.</p> <p>Спектроскопию ЯМР¹³C. Спектры ЯМР¹³C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР¹³C без подавления по протонам, спектры ЯМР¹³C с частичным подавлением протонов. Применение ЯМР¹³C спектров</p>	<p>Не знает:</p> <p>Физических основ явления ядерного магнитного резонанса, условий появления ЯМР-спектров, явления насыщения, релаксационных процессов, влияния условий снятия спектра на его качество. Современных методов и возможностей применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможностей и ограничений использования для установления структуры органических соединений Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса.</p> <p>Спектроскопию ЯМР¹³C, спектры ЯМР¹³C с полным подавлением протонов.</p>	<p>Знает:</p> <p>Физические основы явления ядерного магнитного резонанса, условия появления ЯМР-спектров, явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество.</p> <p>Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможностей и ограничений использования для установления структуры органических соединений Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса.</p> <p>Спектроскопию ЯМР¹³C, спектры ЯМР¹³C с полным подавлением протонов.</p>

	<p>для установки структуры органических соединений.</p> <p>Технику и методику снятия спектров ЯМР. Требования к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров.</p>	<p>Технику и методику снятия спектров ЯМР, требований к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров.</p>	<p>Технику и методику снятия спектров ЯМР, требований к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров</p>
<p>ПК-9.2. Уметь применять полученные теоретические знания для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов</p>	<p>Уметь:</p> <p>Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.</p> <p>Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания.</p> <p>Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹H органических соединений, находить параметры спектров ПМР- X.C. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹³C и применять их для установления структуры органических соединений.</p> <p>Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР</p>	<p>Не умеет:</p> <p>Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.</p> <p>Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания.</p> <p>Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹H органических соединений, находить параметры спектров ПМР- X.C. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹³C и применять их для установления структуры органических соединений.</p> <p>Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР</p>	<p>Умеет:</p> <p>Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.</p> <p>Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания.</p> <p>Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹H органических соединений, находить параметры спектров ПМР- X.C. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹³C и применять их для установления структуры органических соединений.</p> <p>Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР</p>

<p>ПК-9.3. Владеть навыками научного и методологического обоснования схем комплексной аттестации продуктов и технологических схем их получения</p>	<p>Владеть:</p> <p>Навыками установления структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p> <p>Владеть методами и приемами расшифровки спектров.</p> <p>Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.</p> <p>Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений.</p> <p>Навыками расшифровки спектров ЯМР¹Н органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.</p> <p>Навыками использования полученных знаний по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров. в установлении структуры соединений полученных в ходе эксперимента.</p>	<p>Не владеет:</p> <p>Навыками установления структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p> <p>Владеть методами и приемами расшифровки спектров.</p> <p>Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.</p> <p>Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений.</p> <p>Навыками расшифровки спектров ЯМР¹Н органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.</p> <p>Навыками использования полученных знаний по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров. в установлении структуры соединений полученных в ходе эксперимента.</p>	<p>Владеет:</p> <p>Навыками установления структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p> <p>Владеть методами и приемами расшифровки спектров.</p> <p>Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.</p> <p>Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений.</p> <p>Навыками расшифровки спектров ЯМР¹Н органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.</p> <p>Навыками использования полученных знаний по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров. в установлении структуры соединений полученных в ходе эксперимента.</p>
--	--	---	--

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
<p>ПК-9.1. Знать современные методы анализа для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов и их теоретические основы</p>	<p>Знать: Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество. Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса. Спектроскопию ЯМР¹³C. Спектры ЯМР¹³C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР¹³C без подавления по протонам, спектры ЯМР¹³C с частичным подавлением протонов. Применение ЯМР¹³C спектров для установки структуры органических соединений. Технику и методику снятия спектров ЯМР. Требования к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров.</p>	<p>Коллоквиум, контрольная работа, зачет</p>
<p>ПК-9.2. Уметь применять полученные теоретические знания для исследования физических и механических свойств материалов и наноматериалов</p>	<p>Уметь: Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений. Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания.</p>	<p>Контрольная работа</p>

	<p>Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹H органических соединений, находить параметры спектров ПМР- X.C. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.</p> <p>Расшифровывать предложенные спектры ЯМР¹³C и применять их для установления структуры органических соединений.</p> <p>Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР</p>	
<p>ПК-9.3. Владеть навыками-научного и методологического обоснования схем комплексной аттестации продуктов и технологических схем их получения</p>	<p>Владеть:</p> <p>Навыками установления структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p> <p>Владеть методами и приемами расшифровки спектров.</p> <p>Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (X.C.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.</p> <p>Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений.</p> <p>Навыками расшифровки спектров ЯМР¹H органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- X.C. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.</p> <p>Навыками использования полученных знаний по технике и методике снятия спектров ЯМР,</p>	<p>Контрольная работа</p>

	требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров. в установлении структуры соединений полученных в ходе эксперимента.	
--	---	--

Критерии оценки:

- **оценка «зачтено»** выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;

- **оценка «незачтено»** выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Коллоквиум

В ходе коллоквиума осуществляется беседа преподавателя со студентом по вопросам пройденной темы, с целью определения знаний студента. Коллоквиум может служить формой не только проверки, но и повышения знаний студентов.

Примерные вопросы к коллоквиуму:

1. Явления, происходящие с ядрами, имеющими спин $\frac{1}{2}$ в магнитном поле H_0
2. Явление релаксации
3. Стандарты в ЯМР-спектре, виды, достоинства и недостатки каждого
4. Чем объясняется индивидуальность местоположения 1H и ^{13}C в ЯМР.
5. Константа спин-спинового взаимодействия.
6. Характеристика атомного вклада σ_a химический сдвиг.
7. Геминальные, вицинальные и дальние константы спин-спинового взаимодействия.
8. Принцип аддитивности в ЯМР ^{13}C на примере производных бензола.
9. Можно ли различить по ЯМР ацетофенон и α – фенилуксусный альдегид и по каким признакам.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он выполнил 80 - 100% задания;
- оценка «незачтено» выставляется студенту, если он выполнил 79 - 59 % задания.

Контрольная работа

Описание контрольной работы:

Средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу, состоит из небольшого количества средних по трудности вопросов, задач или заданий, требующих поиска обоснованного ответа.

Пример варианта контрольной работы:

Вариант № 1

1. При обработке соединения *A* с брутто-формулой $C_{11}H_{18}O_2$ третбутилгидропероксидом в присутствии гексакарбонила молибдена после осторожной водной обработки получена смесь двух соединений *B* и *V* в соотношении, приведенном на хроматограмме (рис. 5). После обработки этой смеси подкисленным водным раствором HNO_4 и экстракции продукта реакции эфиром, выделены соединения *Г* и ацетон. Установите структуры всех соединений, если их спектральные характеристики следующие: *A*: ЯМР (δ , м. д.): 1H 1.60 с (3H), 1.62 и 1.72 с (6H), 2.08 м (4H), 3.6 с (3H),
B: ЯМР 1H (δ , м. д.): 1.25 с (6H), 1.60 с (3H), 1,86 м (2H), 2.1 т (2H), 3.12 т (1H), 3.62 с (3H), 5.40 с (1H)
V: ЯМР 1H (δ , м. д.): 1.23 с (6H), 1.58 с (3H), 1.92 м (2H), 2.15 т (2H), 3.21 т (1H), 3,60 с (3H), 4,92 с (2H), 5.38 с (1H)
Спектр ПМР (δ , м. д.): 1.62 с (3H), 2.01 т (2H), 2.4 т (2H), 3.6 с (3H), 3.35 с (1H), 9.6 с (1H).
2. Установите структуру двух соединений одинакового брутто состава $C_5H_8O_2$, различных по строению по их ПМР – спектрам.
3. В спектре ПМР диметилформамида $H-CO-N(CH_3)_2$ наблюдаются два синглета от метильных групп. При повышении температуры эти два острых сигнала уширяются, сливаются, а при температуре около 165о образуют один острый пик. Чем вызваны изменения в спектре

ПМР вещества? 4. Установите структуру соединения формулы $C_{15}H_{16}O_2$ по его ПМР – спектру если в его пик - спектре присутствуют полосы поглощения при 1500, 1600 и 3350 см⁻¹.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он выполнил 80 - 100% задания;
- оценка «незачтено» выставляется студенту, если он выполнил 79 - 59 % задания.

Зачет

Вопросы к зачету:

1. Условия, которым должны отвечать ядра, пригодные для ЯМР-спектроскопии. Рассчитайте химические сдвиги 1H и ^{13}C для *m*-нитротолуола.
2. Что входит в понятие «химический сдвиг». Почему ядра одного вида резонируют при различных частотах в ЯМР-спектре?
4. Основы теории возникновения ядерного магнитного резонанса (требования к составу ядра, поведение ядер в постоянном и переменном магнитном полях).
5. Возникновение и влияние диамагнитной и парамагнитной составляющей на химический сдвиг в спектре ПМР. Привести примеры дезэкранирующего влияния этих факторов.
6. Относительные и абсолютные единицы, принятые для выражения химических сдвигов ядер в спектре ПМР и ЯМР ^{13}C . Формулы расчета δ , развертки поля по имеющимся остальным параметрам.
7. Причины возникновения мультиплетности в ЯМР – спектре. Разберите возникновение дублета, триплета и квартета. Характер спектра при наличии у соседних атомов неэквивалентных протонов.
8. Сложные спектры ПМР. АВ и АВХ-системы. Применение спектроскопии двойного ядерного магнитного резонанса для расшифровки спектров ЯМР.
9. Влияние заместителей в ароматическом кольце на химический сдвиг ароматических протонов. Расчет для анилина в спектре ЯМР 1H и ^{13}C .
10. Основные параметры, описывающие спектры ЯМР 1H и ^{13}C . Требования к эталонам, выбираемым за нулевые сигналы при описании ЯМР-спектров.
11. Спин-спиновое взаимодействие протонов в спектре ЯМР 1H , двойной ядерный магний резонанс. Возможности метода.
12. Какими характеристиками описывается ЯМР-спектр? Дать их подробное описание и приемы расчета.
13. Протонный магнитный резонанс. Условия магнитного резонанса. Параметры спектров ПМР. Химический сдвиг (ХС), константа экранирования, измерение ХС, шкала ХС, аддитивные схемы расчета ХС. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ), геминальное взаимодействие, вицинальное взаимодействие, дальнее взаимодействие, Константы ССВ, измерение КССВ. Величина КССВ, зависимость вицинальных КСВ от диэдрального угла между взаимодействующими протонами. Уравнение Карплуса. Интегральная интенсивность. Ширина линии, её измерение. Зависимость ширины линии от времени релаксации.
14. Спектроскопия ПМР. Классификация спиновых систем (номенклатура спиновых систем). Спектры первого порядка, установление регио-изомерии, стереоизомерии. Спектры ПМР второго порядка, АВ- спектр, АВХ- спектр, нахождение ХС и величины констант ССВ.
15. Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Спектры ЯМР ^{13}C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР ^{13}C без подавления по протонам, спектры ЯМР ^{13}C с частичным подавлением протонов. Спектры INERT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Спиновое эхо и J-спектроскопия (гетероядерная J-модуляция).

16. Параметры спектров ЯМР ^{13}C . Химический сдвиг ХС, измерение ХС, шкала ХС. Константы ССВ, прямые углерод-протонные константы, геминальные константы, вицинальные константы ССВ, величины констант ССВ. Зависимость углерод-протонных констант от гибридизации углеродных атомов, от электроотрицательности заместителей. Интегральная интенсивность сигналов ЯМР ^{13}C и ширина линии. Расчеты спектров ЯМР ^{13}C , аддитивные схемы расчетов ХС в спектрах ЯМР ^{13}C по инкрементам.

17. Двумерная спектроскопия ЯМР. Спектроскопия корреляции ХС. Корреляция обусловленная гомоядерным скалярным взаимодействием (COSY, TOCSY). Корреляция обусловленная гетероядерным скалярным взаимодействием (CHCORR, HMBC, HSQC). Двумерная J-спектроскопия, гетероядерная J-спектроскопия (JRES). Примеры двумерных спектров. Эксперимент Inadequate.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он выполнил 80 - 100% задания;
- оценка «незачтено» выставляется студенту, если он выполнил 79 - 59 % задания.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Х.Гюнтер, Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. 480с.
2. Н. М. Сергеев. Спектроскопия ЯМР. М.: МГУ, 1981. 280с.
3. В.А. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. Сборник задач: учеб. пособие для вузов. М.: Химия, 1985. 232 с.
4. Б. И. Ионин, Б. А. Ершов, А. И. Кольцов. ЯМР-спектроскопия в органической химии. Л.: Химия, 1983. 279с.
5. Г. Леви, Г. Нельсон. Руководство по ядерному магнитному резонансу углерода-13 для химиков-органиков. М.: Мир, 1975. 295с.

Дополнительная литература:

1. Э. Бакс. Двумерный ядерный магнитный резонанс в жидкости. Новосибирск: Наука, 1989. 160с.
2. Э. Дероум. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992. 188с.
3. А. Жунке. Ядерный магнитный резонанс в органической химии. М.: Мир, 1974. 176с.
4. Л.А. Козицына, И.Б. Куплетская. Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс спектроскопии в органической химии. М.: МГУ, 1979. 238с.
5. Э. Претч, Ф. Бюльманн, К. Афвольтер. Определение строения органических соединений. (таблицы спектральных данных), издательство «Мир», Москва, 2006
6. О.Сильверстейн, Ф.Вебстер, Д.Кимл. Спектрометрическая идентификация органических соединений. Москва. Бинوم. Лаборатория знаний 2012 г.)
7. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. ICSPF pres 2011/
8. Б. Блюмих. Основы ЯМР. Москва. Техносфера. 2011.
9. Спирихин Л.В., Шепилевич И.С., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Талипова Г.Р., Галин Ф.З. ЯМР-¹H спектроскопия в органической химии: Учебное пособие. Уфа: РИО БашГУ, 2004.-140 с.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Научная электронная библиотека: <http://www.elibrari.ru>
2. Библиотека БашГУ: www.bashlib.ru
3. EMILY (Electronic Membrane Information LibrarY) — Электронная библиотека по мембранам и мембранным технологиям, БО, аннотации материалов периодических изданий, конференций, технических сообщений, книг;
4. Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics (ФАСТ) — База термодинамических свойств и программы расчета равновесного состава многокомпонентных и многофазных систем. Бесплатный доступ к каталогу чистых веществ, базе данных термодинамических свойств чистых веществ, и к модулю простейших термодинамических расчетов;
5. WWW Patent searching и Free Patents Online Database — Поиск патентов;
6. DjVu БИБЛИОТЕКИ
Перечень библиотек DjVu по направлениям: естественно-научные, технические, прочие. Allbest.ru

Программное обеспечение:

1. Пакет офисных приложений профессионального уровня OfficeProfessionalPlus 2013 RussianOLPNLAcademicEdition № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
2. Серверная операционная система Windows Server Standard 2012 Russian OLP NL AcademicEdition 2Proc № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
3. Операционная система для персонального компьютера Win SL & Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
4. Обновление операционной системы для персонального компьютера WindowsProfessional 8 RussianUpgradeOLPNLAcademicEdition № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
5. Desktop Education ALNG LicSAPk OLVS E 1Y Academic Enterprise № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
6. Система электронного тестирования на базе Moodle <http://moodle.bashedu.ru/course/view.php?id=2841> (afferte).

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Лекции</i>	Аудитория. № 402 <i>Учебная мебель, доска.</i>
2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) Центр коллективного пользования УФИХ УФИЦ РАН	<i>Лабораторные работы</i>	Аудитория. № 402 <i>Учебная мебель, доска.</i>
3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Проведение групповых и индивидуальных консультаций</i>	Аудитория. № 402 <i>Учебная мебель, доска.</i>
4. учебная аудитория для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 402, 403 (учебный корпус, ул.	<i>Проведение текущего контроля и промежуточной аттестации</i>	Аудитория. № 402 <i>Учебная мебель, доска.</i> Аудитория № 403 (компьютерный класс) <i>Коммутатор HP V1410-24G</i> <i>Персональный компьютер в комплекте Lenovo ThinkCentre All-In-One (12 um)</i>

Мингажева, 100)		<p><i>Персональный компьютер Моноблок барэбон ECS G11-21ENS6B 21.5 G870/2GDDR31333/320G SATA/DVD+RW (12 шт) Сервер №2 Depo Storm1350Q1 Коммутатор Hewlett Packard HP V1410-8 G.</i></p>
<p>5. помещения для самостоятельной работы: библиотека, аудитория № 201 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) читальный зал №2 (физмат корпус - учебное)</p>	<p><i>Самостоятельная работа</i></p>	<p><i>Аудитория № 201</i> <i>PentiumG2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь</i> <i>ПК в компл. Фермо Intel</i> <i>Intel</i> <i>PentiumG2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь</i> <i>читальный зал №2 (физмат корпус - учебное)</i> <i>PentiumG2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь</i> <i>-5 шт.</i> <i>ПК в компл. Фермо Intel.</i> <i>Моноблок №1 Фермо AMD A8-5500 – 5 шт.</i> <i>Программное обеспечение:</i> <i>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</i> <i>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</i></p>

ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
 НАИМЕНОВАНИЕ ФИЛИАЛА
 НАИМЕНОВАНИЕ ФАКУЛЬТЕТА (ИНСТИТУТА)

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ¹

дисциплины ЯМР-спектроскопия в анализе материалов на ___1___ семестр

Очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (з.е. / часов)	108/3
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	16
практических/ семинарских	
лабораторных	16
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,7
из них, предусмотренные на выполнение курсовой работы / курсового проекта ²	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	75,3
из них, предусмотренные на выполнение курсовой работы / курсового проекта ³	
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	

Форма(ы) контроля:

экзамен _____ семестр

зачет _____ семестр

курсовая работа / курсовой проект _____ семестр

¹ Количество часов/з.е. указывается в соответствии с учебным планом, таблицы заполняются отдельно по каждой форме обучения (очной, очно-заочной, заочной).

² Контактных часов – 2

³ Количество часов на самостоятельную работу указывается на усмотрение разработчика, но не более 20 часов

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Задания по самостоятельной работе студентов ⁴	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Тема 1. Спектры протонного магнитного резонанса высокого разрешения. - Условия магнитного резонанса. - Параметры спектров ПМР.	4		4	16	Проработать соответствующий раздел квантовой химии, подготовиться к лабораторной работе, контрольной работе	Коллоквиум, контрольная работа,
2.	Тема 2. Анализ спектров ПМР. - классификация спиновых систем (номенклатура спиновых систем) - спектры первого порядка, - спектры ПМР второго порядка, Релаксация. Техника эксперимента. ЯМР спектрометры.	4		4	16	Составить таблицу характеристических частот и длин волн для различных классов соединений, подготовиться к лабораторной работе, коллоквиуму, контрольной работе	Коллоквиум, контрольная работа
3.	Тема 3. Спектроско-	4		4	18	Составить таблицу	Коллоквиум, кон-

⁴ К заданиям для самостоятельной работы можно отнести, например: подготовку к индивидуальному или групповому опросу; выполнение домашних заданий; подготовку к лабораторным работам, контрольным работам, собеседованиям, коллоквиумам; изучение теоретического материала; подготовку докладов и сообщений; написание эссе, рефератов и статей; подготовку проектов и творческих заданий (выступлений, презентаций, кроссвордов и пр.) и т.д.

	<p>пия ЯМР ^{13}C. Импульсная спектроскопия ЯМР. Спектроскопия с преобразованием Фурье. Параметры спектров ЯМР ^{13}C. Методы регистрации спектров ЯМР ^{13}C. Расчеты спектров ЯМР ^{13}C, аддитивные схемы расчетов ХС в спектрах ЯМР ^{13}C по инкрементам.</p>					<p>характеристических частот и длин волн для различных классов соединений, подготовиться к лабораторной работе, коллоквиуму, контрольной работе</p>	<p>трольная работа</p>
4.	<p>Тема 4. Двумерная спектроскопия ЯМР. Классическое описание простого двумерного эксперимента. Построение двумерных спектров. Практическое осуществление экспериментов. Виды и применение двумерных спектров ЯМР.</p>	4		4	25,3	<p>Подготовиться к лабораторной работе, коллоквиуму, контрольной работе, зачету</p>	<p>Коллоквиум, контрольная работа, зачет</p>
	Всего часов:	16		16	75,3		

