


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ИНЖЕНЕРНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:  
на заседании кафедры технической химии и  
материаловедения протокол №27 от 11.06.2018  
г.

Согласовано:  
Председатель УМК факультета  
/института

Зав. кафедрой  /Мухамедзянова А.А.

 / Мельникова А.Я.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

«ЯМР-спектроскопия в анализе материалов»

Вариативная часть – Б.1.В.03

**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 2018 г.

Уфа 2019 г.

Составитель / составители:



/ Мурзагулова Э.И.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры технической химии и материаловедения протокол от №27 от 11.06.2018 г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры технической химии и материаловедения: был изменен рейтинг план дисциплины, в списке рекомендованной литературы обновлены ссылки на издания, размещенные в ЭБС БашГУ., протокол № 1 от «31» августа 2019 г.

Заведующий кафедрой



/ Мухамедзянова А.А. /

## Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)
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
  - 4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций
  - 4.3. *Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)*
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины
  - 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины
  - 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Результаты обучения	Формируемые компетенции	Примечание	
Знания	1. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество.		
	2. Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможности и ограничения использования для установления структуры органических соединений ЯМР- спектроскопии.	– способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1); – готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3)	
	3. Современные методы, в том числе возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений		
	4. Основные характеристики спектров ЯМР. Абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.). Влияние электронного окружения на химический сдвиг.		
Умения	1. Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений	– владением знаниями в области современных теоретических концепций различных разделов материаловедения, включая методы синтеза веществ и материалов, анализа их структуры и свойств, фундаментальные навыки научно-	
	2. Грамотно соотносить		

	<p>сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания</p>	<p>исследовательской работы (ОПК-2);</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях материаловедения и в современной технологии материалов (ОПК-3)</li> </ul>	
	<p>3. Определять основные характеристики спектров ЯМР, абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.), влияние электронного окружения на химический сдвиг.</p>		
<p>Владения (навыки/опыт деятельности)</p>	<p>1. Навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением ЯМР-спектromетрии.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4);</li> <li>– готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и</li> </ul>	
	<p>2. Владеть методами и приемами расшифровки спектров</p>		
	<p>3. Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР.</p>		

		<p>механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5);</p> <p>– готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8)</p>	
--	--	--	--

## 2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «ЯМР-спектроскопия в анализе материалов» относится к вариативной части.

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» входит в вариативную часть Образовательной программы подготовки магистров по направлению «Химия, физика и механика материалов», направленности подготовки «Современные материалы для техники и медицины». Она находится в логической взаимосвязи, прежде всего, с базовой частью профессионального цикла, 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, аналитическая, физическая химии, 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», «Сtereoхимия 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», «Практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности», «Преддипломная практика», при подготовке и защите 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

###### ОК-1 – способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу

Этап (уровень) освоения компетенци и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество.	Не знает физических основ явления ядерного магнитного резонанса, условий появления ЯМР-спектров, явления насыщения, релаксационных процессов, влияния условий снятия спектра на его качество.	Знает физические основы явления ядерного магнитного резонанса, условия появления ЯМР-спектров, явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество.
Второй этап (уровень)	Уметь: Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.	Не умеет применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.	Умеет применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.
Третий этап (уровень)	Владеть: Навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.	Не владеет навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных	Владеет навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов



		методов ЯМР-спектроскопии	ЯМР-спектроскопии
--	--	---------------------------	-------------------

**ОК-3 – готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала**

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможности и ограничения использования для установления структуры органических соединений ЯМР- спектроскопии.	Не знает современных методов и возможностей применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможностей и ограничений использования для установления структуры органических соединений ЯМР- спектроскопии.	Демонстрирует знание основ современных методов и возможностей применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможностей и ограничений использования для установления структуры органических соединений ЯМР- спектроскопии.
Второй этап (уровень)	Уметь: Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания.	Не умеет грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания	Умеет грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания
Третий этап (уровень)	Владеть: Владеть методами и приемами расшифровки спектров.	Не владеет методами и приемами расшифровки спектров	Владеет методами и приемами расшифровки спектров

**ОПК-2 – владением знаниями в области современных теоретических концепций различных разделов материаловедения, включая методы синтеза веществ и материалов, анализа их структуры и свойств, фундаментальные навыки научно-исследовательской работы**

Этап (уровень)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»

освоения компетенци и	(показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)		
Первый этап (уровень)	Знать: 1. Основные характеристики спектров ЯМР. Абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.). Влияние электронного окружения на химический сдвиг.	Не знает основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.	Знает основные характеристики спектров ЯМР, абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.), влияние электронного окружения на химический сдвиг.
Второй этап (уровень)	Уметь: Определять основные характеристики спектров ЯМР, абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.), влияние электронного окружения на химический сдвиг.	Не умеет определять основные характеристики спектров ЯМР, абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.), влияние электронного окружения на химический сдвиг.	Умеет определять основные характеристики спектров ЯМР, абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.), влияние электронного окружения на химический сдвиг.
Третий этап (уровень)	Владеть: Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.	Не владеет навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.	Владеет определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.

**ОПК-3 – владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях материаловедения и в современной технологии материалов**

Этап (уровень) освоения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»

компетенци и	заданного уровня освоения компетенций)		
Первый этап (уровень)	Знать: Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса.	Не знает спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности, метод двойного ядерного магнитного резонанса.	Знает спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности, метод двойного ядерного магнитного резонанса.
Второй этап (уровень)	Уметь: Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР.	Не умеет применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР.	Умеет применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР.
Третий этап (уровень)	Владеть: Навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР.	Не владеет навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР.	Владеет навыками применения методов ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР.

**ПК-4 – способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений**

Этап	Планируемые результаты	Критерии оценивания результатов обучения
------	------------------------	--

(уровень) освоения компетенции и	обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	«Не зачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: Спектроскопию ПМР. Классификацию спиновых систем (номенклатуру спиновых систем), химические сдвиги основных видов протонов органических соединений, спектры первого порядка. спектры ПМР второго порядка, АВ- спектр, АВХ- спектр, нахождение ХС и величины констант ССВ.	Не знает или знает фрагментарно спектроскопию ПМР, классификацию спиновых систем (номенклатуру спиновых систем), химические сдвиги основных видов протонов органических соединений, спектры первого порядка, спектры ПМР второго порядка, АВ- спектра, АВХ- спектра, нахождение ХС и величины констант ССВ.	Демонстрирует знание спектроскопии ПМР, классификации спиновых систем (номенклатуры спиновых систем), химических сдвигов основных видов протонов органических соединений, спектров первого порядка, спектров ПМР второго порядка, АВ- спектра, АВХ- спектра, нахождение ХС и величин констант ССВ.
Второй этап (уровень)	Уметь: Расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>1</sup> Н органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.	Не умеет или умеет со значительными ошибками расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>1</sup> Н органических соединений, находить параметры спектров ПМР- Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.	Умеет расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>1</sup> Н органических соединений, находить параметры спектров ПМР- Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.
Третий этап (уровень)	Владеть: Навыками расшифровки спектров ЯМР <sup>1</sup> Н	Не владеет навыками расшифровки спектров ЯМР <sup>1</sup> Н	Владеет навыками расшифровки спектров ЯМР <sup>1</sup> Н

органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- X.C. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.	органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- X.C. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.	органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР- X.C. и величин КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР, установления регио-, стереоизомерии молекулы.
--	--	--

**ПК-5 – готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза**

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: Спектроскопию ЯМР <sup>13</sup> C. Спектры ЯМР <sup>13</sup> C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> C без подавления по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> C с частичным подавлением протонов. Спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Применение ПМР и ЯМР <sup>13</sup> C спектров для установки структуры органических соединений.	Не знает спектроскопию ЯМР <sup>13</sup> C, спектры ЯМР <sup>13</sup> C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> C без подавления по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> C с частичным подавлением протонов, спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT, применение ПМР и ЯМР <sup>13</sup> C спектров для установки структуры органических соединений.	Знает спектроскопию ЯМР <sup>13</sup> C, спектры ЯМР <sup>13</sup> C с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> C без подавления по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> C с частичным подавлением протонов, спектры INEPT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT, применение ПМР и ЯМР <sup>13</sup> C спектров для установки структуры органических соединений.

Второй этап (уровень)	Уметь: Рассчитывать спектры ЯМР <sup>13</sup> С по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ-инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>13</sup> С, находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР <sup>13</sup> С OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений.	Не умеет рассчитывать спектры ЯМР <sup>13</sup> С по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ-инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>13</sup> С, находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР <sup>13</sup> С OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений.	Умеет рассчитывать спектры ЯМР <sup>13</sup> С по аддитивным схемам используя величины α-, β-, γ-, δ-инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>13</sup> С, находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР <sup>13</sup> С OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений.
Третий этап (уровень)	Владеть: Навыками применения ЯМР <sup>13</sup> С спектров для установки структуры органических соединений.	Не владеет навыками применения ЯМР <sup>13</sup> С спектров для установки структуры органических соединений.	Владеет навыками применения ЯМР <sup>13</sup> С спектров для установки структуры органических соединений.

**ПК-8 – готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований**

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
Первый этап (уровень)	Знать: Технику и методику снятия спектров ЯМР. Требования к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-	Не знает техники и методики снятия спектров ЯМР, требований к образцу, растворителю и	Демонстрирует знание техники и методики снятия спектров ЯМР, требований к образцу, растворителю и

	спектров.	условиям снятия ЯМР-спектров.	условиям снятия ЯМР-спектров.
Второй этап (уровень)	Уметь: Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров. Применять ЯМР <sup>13</sup> С спектры для установки структуры органических соединений.	Не умеет использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров, применять ЯМР <sup>13</sup> С спектры для установки структуры органических соединений.	Умеет использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров, применять ЯМР <sup>13</sup> С спектры для установки структуры органических соединений.
Третий этап (уровень)	Владеть: 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	Не владеет 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	Владеет 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.

Критериями оценивания являются оценки, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), Шкалы оценивания:

*для зачета:*

зачтено,

не зачтено.

**4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта**

**деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Оценочные средства
Знания	Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Условия появления ЯМР-спектров. Явление насыщения, релаксационные процессы, влияние условий снятия спектра на его качество.	способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1); готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3)	Коллоквиум, зачет
	Современные методы и возможности применения многомерной спектроскопии для идентификации органических соединений, возможности и ограничения использования для установления структуры органических соединений ЯМР- спектроскопии.	владением знаниями в области современных теоретических концепций различных разделов материаловедения, включая методы синтеза веществ и материалов, анализа их структуры и свойств, фундаментальные навыки научно-исследовательской работы (ОПК-2)	Коллоквиум, зачет
	Основные характеристики спектров ЯМР. Абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.). Влияние электронного окружения на химический сдвиг.	способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и	Контрольная работа



	маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4)	
Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природу, мультиплетность, распределение интенсивности. Метод двойного ядерного магнитного резонанса.	готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5)	Коллоквиум, зачет
Спектроскопию ПМР. Классификацию спиновых систем (номенклатуру спиновых систем), химические сдвиги основных видов протонов органических соединений, спектры первого порядка. спектры ПМР второго порядка, АВ- спектр, АВХ- спектр, нахождение ХС и величины констант ССВ.	готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8)	Коллоквиум, зачет
Спектроскопию ЯМР <sup>13</sup> С. Спектры ЯМР <sup>13</sup> С с полным подавлением по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> С без подавления по протонам, спектры ЯМР <sup>13</sup> С с частичным подавлением протонов. Спектры INERT (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Применение ПМР и ЯМР <sup>13</sup> С спектров для установки структуры органических соединений.		Коллоквиум, контрольная работа, зачет
Технику и методику снятия		Контрольная

	спектров ЯМР. Требования к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров.		работа
Умения	Применять полученные теоретические знания для установления структуры получаемых в результате синтеза или модификации органических низко- и высокомолекулярных соединений.	готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5) готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического и аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8)	Контрольная работа
	Грамотно соотносить сигналы в спектре со структурой молекулы, используя теоретические и практические знания	способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического	Контрольная работа

		материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4)	
	Определять основные характеристики спектров ЯМР, абсолютные величины и относительный химический сдвиг (Х.С.), влияние электронного окружения на химический сдвиг.	владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях	Контрольная работа
	Применять методы ЯМР-спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР.	материаловедения и в современной технологии материалов (ОПК-3)	Контрольная работа
	Расшифровывать предложенные спектры ЯМР <sup>1</sup> H органических соединений, находить параметры спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определять структуру молекулы исходя из данных спектра ЯМР, устанавливать регио-, стереоизомерию молекулы.		Контрольная работа
	Рассчитывать спектры ЯМР <sup>13</sup> C по аддитивным		Контрольная работа

	<p>схемам используя величины <math>\alpha</math>-, <math>\beta</math>-, <math>\gamma</math>-, <math>\delta</math>-инкрементов из таблиц соответствующих производных, расшифровывать предложенные спектры ЯМР<sup>13</sup>C, находить Х.С. углеродных атомов, устанавливать степень протонирования каждого углеродного атома из спектров ЯМР<sup>13</sup>C OFF-резонанса или JMODCH, устанавливать структуры соединений.</p>		
	<p>Использовать полученные знания по технике и методике снятия спектров ЯМР, требованиям к образцу, растворителю и условиям снятия ЯМР-спектров. Применять ЯМР<sup>13</sup>C спектры для установки структуры органических соединений.</p>		Контрольная работа
Владения (навыки / опыт деятельности)	<p>Навыками работы по установлению структуры органических соединений с привлечением современных методов ЯМР-спектроскопии.</p>	<p>владением навыками экспериментальной работы в области современных методов синтеза и диагностики материалов, включая навыки работы со сложным современным научным оборудованием, позволяющих эффективно работать в различных экспериментальных областях материаловедения и в современной технологии материалов (ОПК-3) способностью к комплексному анализу и аналитическому обобщению результатов</p>	Контрольная работа
	<p>Владеть методами и приемами расшифровки спектров.</p>		Контрольная работа
	<p>Навыками определения основных характеристик спектров ЯМР, абсолютных величин и относительного химического сдвига (Х.С.), влияния электронного окружения на химический сдвиг.</p>		Контрольная работа
	<p>Навыками применения методов ЯМР-</p>		Контрольная работа

	<p>спектроскопии для качественного и количественного анализа структуры органических соединений, нахождения параметров спектров ПМР-Х.С. и величины КССВ, определения структуры молекулы исходя из данных спектра ЯМР.</p>	<p>научно-исследовательских работ с использованием современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области наук о материалах, эвристического поиска и детального анализа научной и технической информации, в области химического материаловедения и нанотехнологий и смежных дисциплин для научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок в области современного материаловедения и нанотехнологий (ПК-4)</p>	<p>работа</p>
	<p>Навыками расшифровки спектров ЯМР<sup>1</sup>H 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>готовностью к экспертному исследованию с помощью современных методов анализа природы химических, физических и механических свойств материалов и наноматериалов, а также характера изменения реальной структуры материалов при вариации состава и условий синтеза (ПК-5)</p>	<p>Контрольная работа</p>
	<p>Навыками применения ЯМР<sup>13</sup>C спектров для установки структуры органических соединений.</p>	<p>готовностью к самостоятельной высококвалифицированной эксплуатации современного синтетического</p>	<p>Контрольная работа</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>и</p>	<p>Контрольная работа</p>

		аналитического оборудования и приборов по избранному направлению исследований (ПК-8)	
--	--	--	--

***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  $\sigma_a$  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  $\alpha$  – 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 **B** в соотношении, приведенном на хроматограмме (рис. 5). После обработки этой смеси подкисленным водным раствором  $HIO_4$  и экстракции продукта реакции эфиром, выделены соединения **Г** и ацетон. Установите структуры всех соединений, если их спектральные характеристики следующие: **A**: ЯМР ( $\delta$ , м. д.):  $^1H$  1.60 с (3H), 1.62 и 1.72 с (6H), 2.08 м (4H), 3.6 с (3H),  
**B**: ЯМР $^1H$  ( $\delta$ , 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)  
**B**: ЯМР $^1H$  ( $\delta$ , 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 ( $\delta$ , 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 1650 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  $cm^{-1}$ .

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  $\delta$ , 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 ИНЕРТ (низкочувствительные ядра, усиленные с помощью переноса поляризации) DEPT. Спиновое эхо и J-спектроскопия (гетероядерная J-модуляция).



16. Параметры спектров ЯМР  $^{13}\text{C}$ . 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  $^{13}\text{C}$  и ширина линии. Расчеты спектров ЯМР  $^{13}\text{C}$ , аддитивные схемы расчетов ХС в спектрах ЯМР  $^{13}\text{C}$  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. Аффольтер. 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-<sup>1</sup>H 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](http://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 (ФАКТ) — 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
<b>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа:</b> аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Лекции</i>	<b>Аудитория. № 402</b> <i>Учебная мебель, доска.</i>
<b>2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа:</b> аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) Центр коллективного пользования УФИХ УФИЦ РАН	<i>Лабораторные работы</i>	<b>Аудитория. № 402</b> <i>Учебная мебель, доска.</i>
<b>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций:</b> аудитория № 402 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Проведение групповых и индивидуальных консультаций</i>	<b>Аудитория. № 402</b> <i>Учебная мебель, доска.</i>
<b>4. учебная аудитория для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации:</b> аудитория № 402, 403 (учебный корпус, ул.	<i>Проведение текущего контроля и промежуточной аттестации</i>	<b>Аудитория. № 402</b> <i>Учебная мебель, доска.</i> <b>Аудитория № 403 (компьютерный класс)</b> <i>Коммутатор HP V1410-24G</i> <i>Персональный компьютер в комплекте Lenovo ThinkCentre All-In-One (12 шт)</i> <i>Персональный компьютер Моноблок</i>

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

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

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины ЯМР-спектроскопия в анализе материалов на \_\_\_1\_\_\_ семестр

Очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	108/3
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	16
практических/ семинарских	
лабораторных	18
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,7
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	73,3
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	

Форма(ы) контроля:

зачет \_\_\_2\_\_\_ семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	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	9
1.	<b>Тема 1. Спектры протонного магнитного резонанса высокого разрешения.</b> - Условия магнитного резонанса. - Параметры спектров ПМР.	4		4	16	№1, с. 5-10	Соответствующий раздел квантовой хи-мии	Коллоквиум, контрольная работа, зачет
2.	<b>Тема 2. Анализ спектров ПМР.</b> - классификация спиновых систем (номенклатура спиновых систем) - спектры первого порядка, - спектры ПМР второго порядка, Релаксация. Техника эксперимента. ЯМР спектрометры.	4		4	16	№1, с.11-38 №7, с. 30-56	№1, с. 120-130	Коллоквиум, контрольная работа, зачет

3.	<p><b>Тема 3. Спектроскопия ЯМР <sup>13</sup>C.</b> Импульсная спектроскопия ЯМР. Спектроскопия с преобразованием Фурье. Параметры спектров ЯМР <sup>13</sup>C. Методы регистрации спектров ЯМР <sup>13</sup>C. Расчеты спектров ЯМР <sup>13</sup>C, аддитивные схемы расчетов ХС в спектрах ЯМР <sup>13</sup>C по инкрементам.</p>	4		4	16	<p>№1, с. 42-52 №7, с. 7-23</p>	<p>Составить таблицу характеристических частот и длин волн для различных классов соединений №1, с. 136-146</p>	<p>Коллоквиум, контрольная работа, зачет</p>
4.	<p><b>Тема 4. Двумерная спектроскопия ЯМР.</b> Классическое описание простого двумерного эксперимента. Построение двумерных спектров. Практическое осуществление экспериментов. Виды и применение двумерных спектров ЯМР.</p>	4		6	25,3	<p>№1, с. 53-84 №7, с. 72-88</p>	<p>№1, с. 147-156</p>	<p>Коллоквиум, контрольная работа, зачет</p>
	<b>Всего часов:</b>	16		18	73,3			

