ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УТВЕРЖДАЮ
Директор, д.х.н.
_____ А.В. Иванов
«31» мая 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Применение ЯМР-спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений

основная образовательная программа –
программа подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки,
профиль Органическая химия

Квалификация: Исследователь.
Преподаватель-исследователь.

Год набора: 2018

Иркутск 2018

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 30.07.2014 № 869)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН протокол № 7 от 30 мая 2018 г.

Начальник отдела аспирантуры к.х.н. Н.Н. Трофимова

1. Цели и задачи учебной дисциплины

Рассматриваемая дисциплина относится к факультативным дисциплинам при подготовке аспирантов, обучающихся по профилю 02.00.03 – Органическая химия.

Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской и образовательной деятельности в области химии элементоорганических соединений и в смежных областях науки, формирование компетенций в области физико-химических методов установления состава и строения элементоорганических соединений, формирование навыков самостоятельной работы с приборной и аналитической базой физико-химических методов анализа, компьютерным парком и он-лайн базами данных.

Задачи дисциплины:

- формирование представлений об изучении структуры элементоорганических соединений методом ЯМР спектроскопии;
- ознакомление с основами важнейших современных методик ЯМР спектроскопии и их приложениями по изучению структуры;
- формирование навыков и умений получения и интерпретации ЯМР спектроскопии для установления строения элементоорганических соединений в совокупности с другими физико-химическими методами.

2. Место дисциплины в структуре ООП

2.1. Учебная дисциплина ФТД.2 «Применение ЯМР-спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений» входит в вариативную часть междисциплинарного профессионального модуля ООП.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИрИХ СО РАН, прошедших обучение по программе подготовки магистров или специалистов, прослушавших соответствующие курсы и имеющих по ним положительные оценки. Для освоения дисциплины «Применение ЯМР спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда предшествующих дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

- Физико-химические методы анализа;
- Органическая химия;
- Физическая химия;
- Аналитическая химия;
- Квантовая химия;
- Строение вещества.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Применение ЯМР-спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, профиль Органическая химия:

Общепрофессиональные компетенции:

- Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

Профессиональные компетенции:

- Умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- теоретические и методологические основы метода ЯМР-спектроскопии;
- принципы, условия и методологию применения метода ЯМР-спектроскопии;
- возможности метода ЯМР-спектроскопии в установлении структуры элементоорганических соединений.

Уметь:

- выбирать необходимые и оптимальные методики в рамках метода ЯМР-спектроскопии для установления структуры элементоорганических соединений;
- проводить идентификацию элементоорганических веществ и определять их строение по данным ЯМР-спектроскопии;
- осуществлять поиск информации о структурных параметрах элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем.

Иметь опыт:

- интерпретации данных, полученных с помощью ЯМР-спектроскопии, для исследований структуры элементоорганических соединений;
- моделирования спектральных и структурных параметров элементоорганических веществ с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетная единица (36 часов).

4.1. Структура дисциплины

№	Наименование дисциплины	Объем учебной работы, ч							Вид итогового контроля
		Всего	Всего аудиторн.	Из аудиторных				Самост. работа	
				Лекц.	Лаб.	Практ.	КСР		
1	Применение ЯМР-спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений	36	9	9	-	-	-	27	Зачет

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы и трудоемкость, ч						Формы текущего контроля успеваемости
		Всего	Лекц.	Лаб	Практ	СР	КСР	
1	Основы спектроскопии ЯМР и спектроскопия ЯМР ^{1}H.	6	2	-	-	4	-	Устный групповой опрос
2	Современные методы	6	1	-		5	-	Устный групповой

	ЯМР спектроскопии.							опрос
3	ЯМР на ядрах, отличных от протонов.	4	1	-	-	3	-	Устный групповой опрос
4	Особенности спектроскопии ЯМР фторорганических соединений.	4	1	-	-	3	-	Устный групповой опрос
5	Особенности спектроскопии ЯМР фосфорорганических соединений.	4	1	-	-	3	-	Устный групповой опрос
6	Особенности спектроскопии ЯМР кремнийорганических соединений.	4	1	-	-	3	-	Устный групповой опрос
7	Особенности спектроскопии ЯМР халькогенорганических соединений.	4	1	-	-	3	-	Устный групповой опрос
8	Особенности спектроскопии ЯМР металлорганических соединений.	4	1	-	-	3	-	Устный групповой опрос
Всего часов		**36**	**9**	**-**	**-**	**27**	**-**	

4.2.2. Содержание разделов и тем дисциплины

№	Наименование разделов и тем	Содержание раздела (темы)	Формы проведения занятий
1	Тема 1. Основы спектроскопии ЯМР и спектроскопия ЯМР ^{1}H.	Введение. Основные принципы эксперимента ЯМР. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие и спиновые системы. Спин-спиновое взаимодействие протонов с другими ядрами. Интенсивности спектров ЯМР ^{1}H. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Эффекты кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей. Изотопные эффекты. Химические сдвиги ^{1}H некоторых органических соединений. Спектры ЯМР ^{1}H и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
2	Тема 2. Современные методы ЯМР спектроскопии.	DEPT и J-модулированное “спин-эхо”. Двумерная спектроскопия ЯМР. H-H COSY. C-H COSY (HSC). NOE и NOESY.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
3	Тема 3. ЯМР на ядрах, отличных от протонов.	Особенности спектров ЯМР ядер, отличных от протонов. Относительная чувствительность. Содержание изотопов. Диапазон химических сдвигов. Спектры с развязкой и без развязки от протонов. Спектроскопия ЯМР ^{13}C. Спектроскопия ЯМР ^{15}N. Особенности двумерной спектроскопии ЯМР с участием ядер ^{15}N.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
4	Тема 4.	Спектроскопия ЯМР ^{19}F. Химические сдвиги. Константы	Лекции,

	Особенности спектроскопии ЯМР фторорганических соединений.	спин-спинового взаимодействия ^{19}F-^{19}F, ^{1}H-^{19}F, ^{19}F-^{13}C. ^{1}H Спектры фторорганических соединений. ^{13}C спектры фторорганических соединений.	семинары, самостоятельная работа
5	Тема 5. Особенности спектроскопии ЯМР фосфорорганических соединений.	Спектроскопия ЯМР ^{31}P. Химические сдвиги. Константы спин-спинового взаимодействия с участием ^{31}P. ^{1}H Спектры фосфорорганических соединений. ^{13}C спектры фосфорорганических соединений.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
6	Тема 6. Особенности спектроскопии ЯМР кремнийорганических соединений.	Спектроскопия ЯМР ^{29}Si. ^{1}H и ^{13}C спектры кремнийорганических соединений. Определение строения кремнийорганических соединений по данным спектроскопии ЯМР.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
7	Тема 7. Особенности спектроскопии ЯМР халькогенорганических соединений.	Современное состояние спектроскопии ЯМР ^{17}O, ^{33}S, ^{77}Se и ^{125}Te. Чувствительность метода и методические особенности регистрации спектров ЯМР на ядрах халькогенов. Влияние сольватации и структурных факторов на химические сдвиги халькогенорганических соединений. Константы спин-спинового взаимодействия с участием ядер халькогенов. ^{1}H и ^{13}C спектры халькогенорганических соединений.	Лекции, семинары, самостоятельная работа
8	Тема 8. Особенности спектроскопии ЯМР металлорганических соединений.	ЯМР-спектроскопия литийорганических соединений на ядрах ^{6}Li и ^{7}Li. ЯМР ^{11}B-спектроскопия органических соединений бора. Спектроскопия ЯМР и эффект Мессбауэра на ядрах ^{119}Sn.	Лекции, семинары, самостоятельная работа

5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары.
2. Сопровождение лекций визуальными материалами в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий, проецируемых на экран с помощью видеопроектора.
3. Проведение практических работ в лабораториях, участие обучающихся в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и Интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов

Виды самостоятельной работы:

в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

7.1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущий контроль знаний учащихся организован как устный групповой опрос (УГО).

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений аспиранта.

7.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины «Применение ЯМР-спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений». Форма аттестации – зачет.

Контрольные вопросы к зачету:

1. История открытия ЯМР. Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле.
2. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп.
3. Введение в динамическую спектроскопию ЯМР. Общие положения. Параметры активации.
4. Принципы эксперимента ЯМР. Принципиальное устройство спектрометра ЯМР.
5. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Эффекты кольцевого тока.
6. Практическое применение динамической спектроскопии ЯМР. Вращение вокруг одинарных связей С-С.
7. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента.
8. Эффекты электрического поля.
9. Вращение вокруг частично двойных связей. Вращение вокруг двойных связей С=С.
10. Релаксация. Фазовая когерентность.
11. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей.
12. Инверсия атомов азота и фосфора. Инверсия циклов. Валентная таутомерия.
13. Определение химического сдвига.
14. Изотопные эффекты.
15. Развязывание спина" в спектроскопии ЯМР ^{1}H. Подавление сигнала растворителя.
16. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновая система АХ. Спиновая система АХ2.
17. Химические сдвиги ^{1}H, ^{13}C представителей фторорганических соединений.
18. "Развязывание спинов" в спектроскопии ЯМР ^{13}C. Частичная развязка от протонов."1H -off-resonance".
19. Спин-спиновое взаимодействие. Спиновые системы АХn. Правила мультиплетности. Спиновая система АМХ. Спиновые системы Аn.
20. Химические сдвиги ^{1}H и ^{13}C представителей фосфорорганических соединений.
21. Спин-спиновое взаимодействие. Правила мультиплетности.
22. Химические сдвиги ^{1}H и ^{13}C представителей кремнийорганических соединений.
23. Ядерный эффект Оверхаузера. Применение ЯЭО для изучения особенностей структуры соединений.
24. Номенклатура спиновых систем. Спиновая система АВ. Системы АХ → АВ → А2.
25. Химические сдвиги протонов ОН, SH и NH групп.

26. Геминальные константы спин-спинового взаимодействия.
27. Трехспиновые системы. Трехспиновая система ABX.
28. Химические сдвиги ^{1}H и ^{13}C представителей халькогенорганических соединений.
29. Гетероядерная 2D-J,δ-спектроскопия ЯМР ^{13}C.
30. Четырехспиновые системы. Спиновые системы A2X2 и A2B2. Спиновые системы AA´XX´ и AA´BB´.
31. Химические сдвиги ^{1}H и ^{13}C представителей металлоорганических соединений.
32. Гомоядерная (^{1}H, ^{1}H) 2D -корреляционная спектроскопия (COSY) ЯМР.
33. Спин-спиновое взаимодействие протонов с другими ядрами.
34. Химические сдвиги ^{15}N органических и элементоорганических соединений.
35. Гетероядерная (^{13}C, ^{1}H) 2D -корреляционная спектроскопия (HETCOR) ЯМР.
36. Спиновая система AMX. Спиновые системы An. Правила интерпретации сверхтонкой структуры в спектрах ЯМР.
37. Химические сдвиги ^{19}F в спектрах ЯМР фторорганических соединений.
38. Двумерная ЯМР (^{1}H, ^{1}H) спектроскопия (NOESY).
39. Интенсивности спектров ЯМР.
40. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность.
41. Вицинальные константы спин-спинового взаимодействия. Зависимость вицинальной константы от двугранного угла.
42. Дальние константы спин-спинового взаимодействия. Прямые константы спин-спинового взаимодействия.
43. Особенности спектров ЯМР ядер, отличных от протонов.
44. Спектроскопия ЯМР ^{15}N. Особенности двумерной спектроскопии ЯМР с участием ядер ^{15}N.
45. Спектроскопия ЯМР ^{19}F. Химические сдвиги. Константы спин-спинового взаимодействия ^{19}F-^{19}F, ^{1}H-^{19}F, ^{19}F-^{13}C.
46. Спектроскопия ЯМР ^{31}P. Химические сдвиги. Константы спин-спинового взаимодействия с участием ^{31}P.
47. Спектроскопия ЯМР ^{29}Si. ^{1}H и ^{13}C спектры кремнийорганических соединений. Определение строения кремнийорганических соединений по данным спектроскопии ЯМР.
48. Современное состояние спектроскопии ЯМР ^{17}O, ^{33}S, ^{77}Se и ^{125}Te. ^{1}H и ^{13}C спектры халькогенорганических соединений.
49. ЯМР-спектроскопия литийорганических соединений на ядрах ^{6}Li и ^{7}Li.
50. ЯМР ^{11}B-спектроскопия органических соединений бора.
51. Спектроскопия ЯМР на ядрах ^{119}Sn.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение учебной дисциплины

Основная литература

1. Афанасьев, Б. Н. Физическая химия / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. – М.: Лань, 2012. – 464 с.
2. Горшков, В. И. Основы физической химии / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 407 с.
3. Илиел, Э. Основы органической стереохимии / Э. Илиел. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 703 с.
4. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р.Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 557 с.
5. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия / К. Эльшенбройх. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.

Дополнительная литература

1. Кленин, В. И. Высокомолекулярные соединения / В. И. Кленин, И. В. Федусенко. – М.: Лань, 2013. – 512 с.

2. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 1 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 567 с.
3. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 2 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 623 с.
4. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 3 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 544 с.
5. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 4 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 726 с.
6. Смит, В. А. Основы современного органического синтеза. Учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.
7. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 1 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 368 с.
8. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 2 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 517 с.
9. Травень, В. Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: В 3-ех т. Т. 3 / В. Ф. Травень. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 388 с.
10. Хельвинкель, Д. Систематическая номенклатура органических соединений / Д. Хельвинкель. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 232 с.

Интернет-ресурсы

- Taylor &Francis (журналы издательства)
- American Chemical Society
- Thieme Chemistry
- Wiley Online Library
- Royal Society Chemistry
- Springer
- Sci Finder (Chemical Abstracts Service)
- Web of Science
- Реферативная база данных ГПНТБ СО РАН
- E-library
- ЭБС «Издательство «Лань»

9. Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины

Для освоения программы обучения и для выполнения научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. При выполнении квалификационных и диссертационных работ аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование и др.), а также имеют доступ к дорогостоящему оборудованию ИрИХ и Байкальского центра коллективного пользования СО РАН (цифровой мультиядерный Фурье-спектрометр ЯМР DPX-400, ЯМР-спектрометр AV-400 фирмы Bruker Bio-Spin, хроматомасс-спектрометр GCMS-QP5050A фирмы SHIMADZU, импульсный ЭПР-спектрометр Bruker ELEXSYS E580, инфракрасный Фурье-спектрометр IFS-25 фирмы Bruker, ИК-КР Фурье спектрометры Varian и Vertex-70 фирмы Varian, UV/VIS-спектрометр Lamda 35 фирмы Perkin Elmer, спектрофлуориметр LS55, изготовитель Perkin Elmer, порошковый дифрактометр D2 PHASER, монокристаллический дифрактометр D8 VENTURE и др.) Для проведения квантово-химических расчетов имеется вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб и необходимое программное обеспечение.