

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор по образовательной  
деятельности

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев  
«\_\_» \_\_\_\_\_

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1143588	Строение и свойства органических соединений

Екатеринбург

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Химия	<b>Код ОП</b> 1. 04.04.01/33.02
<b>Направление подготовки</b> 1. Химия	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 04.04.01

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Мошкин Владимир Сергеевич	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	органической химии и высокомолекулярных соединений
2	Обыденнов Дмитрий Львович	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	органической химии и высокомолекулярных соединений

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Структура и свойства органических соединений

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль содержит дисциплины: «Структура и реакционная способность органических соединений», «Современные методы ЯМР-спектроскопии». Целью модуля является формирование у студентов представлений о реакционной способности органических соединений и связи ее со структурой, а также об установлении строения веществ с помощью спектроскопии ЯМР. В модуле уделяется внимание проблеме предсказания реакционной способности органических соединений и определения наиболее вероятного пути их взаимодействия, что позволяет планировать сложные и многостадийные синтезы. Спектроскопия ЯМР является основным методом в органической химии установления строения, структурных особенностей и реакционной способности органических соединений

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Структура и реакционная способность органических соединений	3
2	Современные методы ЯМР-спектроскопии	3
ИТОГО по модулю:		6

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Химия гетероциклических соединений
Постреквизиты и кореквизиты модуля	1. Современный органический синтез

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Современные методы ЯМР-спектроскопии	ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и	З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и

<p>прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
<p>ПК-1 - Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов решения научно-исследовательских задач в выбранной области профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</p> <p>У-2 - Составлять общий план научно-исследовательской работы и детальные планы ее отдельных стадий</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения поставленных задач и прогнозирования результатов исследования, исходя из наличия материальных и временных ресурсов</p>
<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p>	<p>З-1 - Представлять возможности существующих поисковых систем и электронных библиотек, используемые для поиска химической, в том числе патентной информации</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по</p>

		тематике проекта в выбранной области химии и/или смежных наук
	ПК-3 - Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	<p>З-1 - Представлять актуальные направления теоретических и экспериментальных исследований и областей практического применения результатов в выбранной области химии или смежных науках</p> <p>У-1 - Определять возможные направления развития теоретических и экспериментальных работ и перспективы практического применения полученных результатов в своей профессиональной области</p> <p>П-1 - Иметь опыт прогнозирования направления собственных исследований с учетом практического применения результатов</p> <p>П-2 - Иметь опыт анализа полученных экспериментальных и/или теоретических результатов собственного исследования в сравнении с литературными данными</p>
	ПК-4 - Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения технологических задач</p> <p>У-1 - Предлагать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР с учетом глобальных вызовов и неопределенностей</p>
Структура и реакционная способность органических соединений	ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p>

	<p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p>
ПК-1 - Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов решения научно-исследовательских задач в выбранной области профессиональной деятельности</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов планирования научно-исследовательской работы</p> <p>У-1 - Выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</p> <p>У-2 - Составлять общий план научно-исследовательской работы и детальные планы ее отдельных стадий</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения поставленных задач и прогнозирования результатов исследования, исходя из наличия материальных и временных ресурсов</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования НИР в целом и отдельных стадий НИР</p>
ПК-2 - Способен проводить патентно-	З-1 - Представлять возможности существующих поисковых систем и

<p>информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p>	<p>электронных библиотек, используемые для поиска химической, в том числе патентной информации</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии и смежным областям</p>
<p>ПК-3 - Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Представлять актуальные направления теоретических и экспериментальных исследований и областей практического применения результатов в выбранной области химии или смежных науках</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов анализа и систематизации результатов НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Определять возможные направления развития теоретических и экспериментальных работ и перспективы практического применения полученных результатов в своей профессиональной области</p> <p>У-2 - Систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными</p> <p>П-1 - Иметь опыт прогнозирования направления собственных исследований с учетом практического применения результатов</p> <p>П-2 - Иметь опыт анализа полученных экспериментальных и/или теоретических результатов собственного исследования в сравнении с литературными данными</p>
<p>ПК-4 - Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения технологических задач</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов организации и планирования</p>

		<p>материально-технического сопровождения НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Предлагать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-2 - Планировать отдельные стадии и работу в целом, организовать материально-техническое сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР с учетом глобальных вызовов и неопределенностей</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования отдельных стадий НИР и НИОКР и работы в целом, материально-технического сопровождения прикладных НИР и НИОКР</p>
--	--	---

### **1.5. Форма обучения**

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Структура и реакционная способность**  
**органических соединений**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Обыденнов Дмитрий Львович	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	Кафедра органической химии и высокомолекуляр ных соединений

**Рекомендовано учебно-методическим советом института** Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- **Обыденнов Дмитрий Львович, Доцент, органической химии и высокомолекулярных соединений**

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Конформационный анализ	<p>1) Конформационный барьер. Скошенные и заслоненные конформации. Типы заслоненных взаимодействий. Равновесие между конформерами (заселенность). Конформеры пентана. Двойная гош-конформация. син-Пентановое взаимодействие. Оценка конформационных барьеров. Конформации алкенов.</p> <p>2) Описание строение циклопропанового цикла. Стабилизация карбкатионного центра циклопропановым циклом. Строение циклобутана. Монозамещенные производные циклобутана, 1,2- и 1,3-дизамещенные производные циклобутана. Конформации циклопентана. Псевдовращение. 1,2- и 1,3-Дизамещенные производные циклопентана. Производные пентана с экзоциклической двойной связью. Конформации циклогексана. Монозамещенные производные циклогексана. 1,2-, 1,3- и 1,4-Дизамещенные производные циклогексана. Производные циклогексана с экзоциклической двойной связью. Конформационный анализ производных пирана, пиррола, 1,3-диоксана.</p> <p>3) Конформация и реакционная способность. Уравнение Уинстейна-Холнесса и принцип Кертвина-Гаммета. Реакционная способность ненасыщенных циклических систем. Стереохимические особенности присоединения к циклоалканонам.</p>

		<p>4) Циклизация как функция размера цикла, а также природы атомов и заместителей в кольце. Правила Болдуина.</p> <p>5) Стереохимия нуклеофильного присоединения по карбонильной группе. Правило Крама. Правило Фелкина-Ана. Модель хелатирования. Модель Тракслера-Циммермана. Органокатализ.</p> <p>6) Стереоселективность реакций восстановления и окисления как методов получения оптически чистых соединений. Эпоксидирование по Шарплессу. Восстановление по Нойори и Кори-Бакши-Шибата.</p>
2	Индексы реакционной способности (ИРС)	<p>1) Граничные орбитали реагирующих систем. Орбитальный и зарядовый контроль. Эффект сольватации. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Взаимосвязь электроотрицательность – потенциал ионизации – сред-ство к электрону – жесткость. Следствия теории ЖМКО.</p> <p>2) Некоторые положения теории функционала плотности. Локальные характеристики реагирующих систем. Функции Фукуи, локальная жесткость (мягкость). Кон-турные карты функций Фукуи. Конденсированные функ-ции Фукуи. Использование функций Фукуи, значений локальной мягкости (жесткости) для определения пре-имущественного направления протекания реакции.</p> <p>3) Эффекты заместителей. Пространственные за-труднения. Внутримолекулярная водородная связь. Сме-щение электронной плотности. Полярность. Поляриза-ция. Амбидентность. Сопряженные системы. Альфа-эффект. Влияние растворителя на реакционную способ-ность органических соединений.</p> <p>4) Ароматичность: правило Хюккеля, критерии аро-матичности: энергетические, структурные (индекс Берда, НОМА), магнитные (NICS).</p>

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Структура и реакционная способность органических соединений

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Денисов, В. Я.; Стереохимия органических соединений : учебное пособие.; Кемеровский

государственный университет, Кемерово; 2013; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232336> (Электронное издание)

### Печатные издания

1. Смит, В. А.; Основы современного органического синтеза; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2009 (21 экз.)
2. Потапов, В. М.; Стереохимия : [учебное пособие для химических специальностей университетов].; Химия, Москва; 1988 (16 экз.)

### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

- 1) [www.reaxys.com](http://www.reaxys.com)
- 2) [www.khimia.ru/](http://www.khimia.ru/)

### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Поисковая система [scifinder.cas.org](http://scifinder.cas.org)

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Структура и реакционная способность органических соединений

### Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

		<p>Доска аудиторная</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	
3	Консультации	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p>
5	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p>	Не требуется

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Современные методы ЯМР-спектроскопии**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Мошкин Владимир Сергеевич	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	Кафедра органической химии и высокомолекуляр ных соединений

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- **Мошкин Владимир Сергеевич, Доцент, органической химии и высокомолекулярных соединений**

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Общая характеристика ЯМР спектроскопии	<p>1. Классическое описание явления ЯМР. Векторная модель макроскопической намагниченности. Прецессия. Теорема Лармора. Феноменологические уравнения Блоха. Продольная (T1) и поперечная (T2) релаксация. Вращающаяся система координат (ВСК). Уравнения Блоха во ВСК. Импульс.</p> <p>2. Импульсный эксперимент. Основные параметры одноимпульсного эксперимента. Векторы и уровни энергии. Описание продольной и поперечной релаксации во ВСК. Отклонение импульса от резонанса. Эволюция под действием химического сдвига и спин-спинового взаимодействия. Оси и фазы. Оптимизация параметров импульсного эксперимента. Квадратурное детектирование и аналого-цифровое преобразование. Формула Эрнста.</p> <p>3. Простейшие эксперименты. Метод "инверсии-восстановления" – измерение T1. "Спиновое эхо" (эксперимент Хана) – поведение гомо- и гетероядерных спиновых систем.</p> <p>4. Методы регистрации спектров ЯМР "редких" ядер. Подавление спин-спинового взаимодействия с протонами – развязка. Методы развязки от протонов: селективная, широкополосная, внерезонансная, переключаемая развязка. Многоимпульсные последовательности JMOD, APT, SEMUT.</p>

		<p>5. Ядерный эффект Оверхаузера (ЯЭО). Происхождение ЯЭО. Пути и причины релаксации. ЯЭО и межъядерные расстояния. Метод измерения ЯЭО.</p> <p>6. Перенос поляризации. Введение – чувствительность метода ЯМР. Селективная инверсия заселенности. Импульсные последовательности INEPT, DEPT – применение для повышения чувствительности и редактирования спектров <math>^{13}\text{C}</math>.</p> <p>7. Спектроскопия ЯМР <math>^{13}\text{C}</math>. Химические сдвиги ядер <math>^{13}\text{C}</math>. Константы спин-спинового взаимодействия ядер <math>^{13}\text{C}</math> – прямые и дальние константы <math>^{13}\text{C}</math>–<math>^1\text{H}</math>.</p> <p>8. Спектроскопия ЯМР <math>^{19}\text{F}</math>. Химические сдвиги ядер <math>^{19}\text{F}</math>. Константы спин-спинового взаимодействия <math>^{19}\text{F}</math>–<math>^{19}\text{F}</math> и <math>^{19}\text{F}</math>–<math>^1\text{H}</math>. Взаимодействие "через пространство".</p>
2	Специальные методы ЯМР спектроскопии	<p>1. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР. Динамические процессы в органических соединениях – химический обмен. Количественное описание динамического ЯМР. Формулы химической кинетики. Основные виды внутренней динамики органических молекул: заторможенное внутреннее вращение, инверсия конфигурации, инверсия цикла, валентная таутомерия.</p> <p>2. Основы двумерной ЯМР спектроскопии. Принципы генерации второго измерения. Концепция "меченых частот" – эксперимент Джинера. Концепция переноса когерентности. Классификация 2D-экспериментов. Гомоядерная корреляционная спектроскопия: COSY, DQF-COSY, TOCSY, INADEQUATE. Гетероядерная корреляционная спектроскопия – прямые и инверсные эксперименты: HETCOR, COLOC, HMQC, HSQC, HMBC. 2D-спектроскопия ЯЭО – эксперименты: NOESY, ROESY, HOESY. Некоторые практические аспекты 2D-спектроскопии ЯМР.</p> <p>3. Обработка данных ЯМР экспериментов на персональном компьютере. Основные принципы и этапы обработки данных: взвешивающие функции и аподизация, дополнение нулями, быстрое преобразование Фурье, фазовая коррекция и источники фазовых ошибок, коррекция базовой линии спектра, интегрирование, частотные метки. Практическое освоение программы MestReNova.</p>

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

### 1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .



## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Современные методы ЯМР-спектроскопии

#### Электронные ресурсы (издания)

1. ; Ядерный магнитный резонанс в структурных исследованиях : монография.; КРАСАНД, Москва; 2016; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=469648> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Ионин, Б. И., Ершов, Б. А.; ЯМР-спектроскопия в органической химии; Химия, Ленинградское отделение, Ленинград; 1983 (4 экз.)
2. Лундин, А. Г.; ЯМР-спектроскопия; Наука, Москва; 1986 (7 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

[https://toukach.ru/files/nmr\\_slides.pdf](https://toukach.ru/files/nmr_slides.pdf)

#### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

#### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- 1) [www.reaxys.com](http://www.reaxys.com)
- 2) [scifinder.cas.org](http://scifinder.cas.org)

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Современные методы ЯМР-спектроскопии

#### Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc

		соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов	Не требуется