

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет хімічний
Кафедра органічної хімії

Затверджено
на засіданні кафедри органічної хімії
хімічного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 34 від 07.02.2020 р.)



Завідувач кафедри органічної хімії,
проф. М.Д. Обушак

Силабус з навчальної дисципліни
«Спектральні методи в органічній хімії»,
що викладається в межах ОПП (ОПН) третього (освітньо-наукового)
рівня вищої освіти для здобувачів

Львів 2020 р.

Назва курсу	Спектральні методи в органічній хімії
Адреса викладання курсу	вул. Кирила і Мефодія 6, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	хімічний факультет, кафедра органічної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки 102 Хімія
Викладачі курсу	Карп'як Володимир Володимирович, к.х.н., доц. кафедри органічної хімії
Контактна інформація викладачів	karpyak01@gmail.com
Консультації по курсу відбуваються	Щоп`ятниці, 15:00-17.00 год. (вул. Кирила і Мефодія 6, ауд. 3)
Сторінка курсу	https://chem.lnu.edu.ua/academics/postgraduates https://chem.lnu.edu.ua/employee/karpyak-volodymyr-volodymyrovych
Інформація про курс	Курс розроблено таким чином, щоб надати здобувачам необхідні теоретичні знання і практичні навички, які дозволять оволодіти знаннями про застосування ЯМР-спектроскопії, мас-спектрометрії та інших спектральних методів у дослідженнях з органічної хімії та для з'ясування будови органічних сполук.
Коротка анотація курсу	Дисципліна «Спектральні методи в органічній хімії» є вибірковою дисципліною для освітньої програми з підготовки доктора філософії, яка викладається на 2-му курсі (4-й семестр) в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Мета та цілі курсу	Метою і завданням навчальної дисципліни «Спектральні методи в органічній хімії» є формування теоретичних знань і практичних навичок у галузі спектральних методів дослідження, оволодіння фізико-хімічними методами встановлення будови органічних сполук, комп'ютерними програмами для розшифрування спектрів, що дасть змогу ефективно застосовувати ці знання при інтерпретації експериментальних даних під час виконання дисертаційних робіт.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерний магнітний резонанс. Київ, 2007. 2. Кларидж Т.Д.В. Сучасні методи ЯМР високого розділення в хімії / Пер. з англ. Турова О.В. Київ, 2006. 3. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии. Москва, 2003. 4. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М., 1992. 5. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований М., 1992. 6. Дзіковська Л. Застосування ІЧ- та ПМР-спектроскопії для з'ясування будови органічних речовин. Львів: Львівський університет, 1999.

	<p>Допоміжна:</p> <ol style="list-style-type: none"> Корнілов М.Ю., Туров О.В., Борсдорф Р., Клейнпетер Е. Ядерний магнітний резонанс у запитаннях і відповідях. Київ: Вища школа, 1995. Хауссер К.Х., Кальбитцер Х.Р. ЯМР в медицині і біології: структура, томографія, спектроскопія in vivo. Київ: Наукова думка, 1993. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. Москва, 1984. <p>Інформаційні ресурси: https://sdb.sdb.db.aist.go.jp/sdb/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi</p>
Тривалість курсу	90 год.
Обсяг курсу	48 годин аудиторних занять (лекції – 32 год., практичні – 16 год.) та 42 годин самостійної роботи (очна форма навчання); 18 годин аудиторних занять (лекції – 12 год., практичні – 6 год.) та 72 годин самостійної роботи (заочна форма навчання).
Очікувані результати навчання	В результаті вивчення цього курсу аспірант повинен знати: <ul style="list-style-type: none"> - теоретичні основи ЯМР-спектроскопії і мас-спектрометрії органічних сполук; - закономірності фрагментації молекулярних іонів у мас-спектрометрії; - можливості практичного застосування ЯМР-спектроскопії і мас-спектрометрії, а також інших спектральних методів для встановлення будови органічних сполук. вміти: <ul style="list-style-type: none"> - розшифровувати ЯМР-, ІЧ- та УФ-спектри органічних речовин; - здійснювати віднесення сигналів ЯМР-спектрів, аналізувати спін-спінову взаємодію ядер; - аналізувати вплив структурних фрагментів на максимум поглинання в УФ-спектрі; - визначати функційні групи за даними ІЧ-спектрів; - здійснювати комп'ютерну обробку результатів у спектроскопії ЯМР; - інтерпретувати мас-спектри та встановлювати структуру органічної сполуки за даними фрагментації молекулярних іонів.
Ключові слова	Спектральні методи, ЯМР-спектроскопія, мас-спектрометрія, спін-спінова взаємодія
Формат курсу	Очний /заочний
	Проведення лекцій, практичних занять і консультацій для кращого розуміння тем
Теми	Подано у таблиці
Підсумковий контроль, форма	Екзамен у кінці семестру комбінований
Пререквізити	Викладання навчальної дисципліни базується на знаннях, отриманих в результаті вивчення попередніх навчальних дисциплін та набуття компетенцій після завершення навчання на рівні бакалавра і магістра.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися	Презентація, лекції, колаборативне навчання (форми – групові проекти, спільні розробки), творче індивідуальне завдання, дискусія.

<p>під час викладання курсу</p>	<p>Робота в системі Moodle, побудова електронного навчання як простору прояву пізнавальних ініціатив.</p>
<p>Необхідне обладнання</p>	<p>Персональний комп'ютер, загальноживані комп'ютерні програми, програма Mestre, проектор.</p>
<p>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</p>	<p>Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на поточному тестуванні, самостійній роботі та бали підсумкового тестування. Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • практичні: 25% семестрової оцінки; • контрольні заміри: 25% семестрової оцінки; • екзамен: 50% семестрової оцінки. <p>Підсумкова максимальна кількість балів – 100. Здобувачі виконують два види письмових та презентаційних робіт.</p> <p>Презентація на одну із тем: „Детальний аналіз спектральних даних ЯМР нової синтезованої сполуки дисертаційної роботи”, „Аналіз мас-спектру нової синтезованої сполуки”, „Демонстрація можливостей доведення будови складної органічної сполуки, взятої з опублікованих джерел, на підставі аналізу даних ІЧ-, ЯМР- та мас-спектрів”.</p> <p>Письмові роботи: комплексний аналіз пакету спектральних даних для доведення будови органічної сполуки.</p> <p>Відвідання занять: Здобувачі повинні відвідувати усі лекції і практичні заняття курсу та мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття з поважних причин.</p> <p>Література. Уся література, яку здобувачі не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем.</p> <p>Порушення академічної доброчесності не толеруються.</p>
<p>Питання до заліку чи екзамену.</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Будова спектрометра ЯМР. 2. Залежність хімічного зсуву від електронного оточення ядер. Релаксаційні процеси. 3. Механізм екранування магнітних ядер. 4. Спін-спінова взаємодія. Класифікація спінових систем. 5. Спектри ЯМР першого і вищого порядків. 6. Принципи аналізу спінових систем AB^2, AB^3, A^2B^3, ABX^n, ABR^nX^m. 7. Методи реєстрації спектрів ЯМР високого розділення. 8. Методи спрощення спектрів речовин складної будови. 9. Двовимірна спектроскопія ЯМР. 10. Спектроскопія ЯМР на ядрах ^{13}C. 11. Комп'ютерні програми Mestre-C, Win NMR для обробки файлів спектрів ЯМР, програми-симулятори спектрів ЯМР (пакет ACD Labs). 12. Принципи мас-спектрометрії. Методи йонізації молекул органічних сполук. 13. Основні закономірності фрагментації молекулярних йонів. 14. Якісний і кількісний аналіз за допомогою електронної спектроскопії. 15. Застосування спектроскопії електронного парамагнітного резонансу.
<p>Опитування</p>	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.</p>

Схема курсу
Лекційний курс навчальної дисципліни

№	Назви змістових модулів і тем	Кількість годин			
		лк	пр	лаб	ср
1	Спектроскопія ядерного магнітного резонансу	6	2	–	8
2	Спектри ЯМР першого і вищого порядків. Спінові системи	6	2	–	8
3	Методи спрощення спектрів речовин складної будови. Імпульсні методи спектроскопії ЯМР. Спектроскопія ЯМР на ядрах ^{13}C	6	2	–	6
4	Комп'ютерна обробка результатів у спектроскопії ЯМР	4	4	–	6
5	Застосування мас-спектрометрії та хромато-мас-спектрометрії	6	4	–	8
6	Застосування електронної та інфрачервоної спектроскопії в органічній хімії	4	2		6
	ВСЬОГО	32	16	–	42

Теми практичних занять

№	Назва теми	Кількість годин
1	Освоєння комп'ютерних програм, Mestre-C, Win NMR для обробки файлів спектрів ЯМР. Користування програмами-симуляторами спектрів ЯМР (пакет ACD Labs)	2
2	Розшифрування спектрів ЯМР ^1H	2
3	Структурний аналіз за даними спектрів ЯМР ^1H . Аналіз спінових систем, визначення констант спін-спінової взаємодії	2
4	Комп'ютерна обробка файлів спектрів ЯМР ^1H	2
5	Розшифрування спектрів ЯМР ^{13}C і структурний аналіз за даними цих спектрів	2
6	Робота зі спектральними (ЯМР) базами даних	2
7	Розшифрування мас-спектрів	2
8	Розшифрування УФ- та ІЧ-спектрів	2
	ВСЬОГО	16