



Факультет	Естественных наук	
Кафедра	Химии	
Направление подготовки	04.04.01 Химия	
Направленность (профиль)	Экспертиза биологически активных соединений	
Методы ЯМР спектроскопии в анализе биологически активных веществ	Б1.В.ДВ.01.01	

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого»
ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л.Н. Толстого»

УТВЕРЖДЕНА
на заседании
Ученого совета университета
протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Рабочая программа дисциплины
«Методы ЯМР спектроскопии в анализе биологически активных
веществ»

Трудоемкость: 3 зачетные единицы

Квалификация выпускника: Магистр

Форма обучения: очно-заочная

Год начала обучения: 2016

Заведующий кафедрой химии  Ю.М. Атрощенко

Декан ФЕН



И.В. Шахкельдян

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	4
3. Объем дисциплины и виды учебной работы.....	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и видов учебных	4
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	5
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине	5
6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.....	5
6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы.....	7
6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.....	9
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	10
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем	13
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	14
12. Аннотация рабочей программы дисциплины.	15
13. Лист регистрации изменений к рабочей программе дисциплины	16
Разработчик:	17

1. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Достижение планируемых результатов обучения, соотнесенных с общими целями и задачами ОПОП, является целью освоения дисциплины.

Планируемые результаты освоения образовательной программы (код и название компетенции)	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования компетенции в процессе освоения образовательной программы
<p>ПК-3 готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований</p>	<p>знает: методологические основы физико-химического эксперимента умеет: выбирать и применять различные методы ЯМР спектроскопии для проведения экспериментальных и научных исследований, для решения конкретных профессиональных задач владеет и (или) имеет опыт деятельности: навыками расшифровки и интерпретации ЯМР спектров органических веществ</p>	<p>в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП</p>
<p>ДПК-1 знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования.</p>	<p>знает: структуру, строение и свойства биологически активных соединений и инструментальные методы их исследования умеет: применять метод ЯМР спектроскопии для изучения состава и строения биологически активных соединений владеет и (или) имеет опыт деятельности: методикой определения строения биологически активных соединений с помощью ЯМР спектроскопии</p>	<p>в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП</p>
<p>ДПК-2 владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соеди-</p>	<p>знает: теоретические основы метода ЯМР спектроскопии умеет: использовать методы ЯМР спектроскопии для идентификации биологически активных соединений владеет и (или) имеет опыт деятельности: методами статистической обработки результатов измерений с целью оценки точности и надежности измерений анализа и оценки спектральных исследований</p>	<p>в соответствии с учебным планом и планируемыми результатами освоения ОПОП</p>

нений

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП МАГИСТРАТУРЫ

Дисциплина «Методы ЯМР спектроскопии в анализе биологически активных веществ» является дисциплиной по выбору вариативной части Блока 1 учебного плана. Изучение данной дисциплины базируется на знаниях студентами органической, неорганической, физической, аналитической, биологической и токсикологической химии.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем зачетных единиц / часов по формам обучения
Максимальная учебная нагрузка (всего)	3/108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего)	16
в том числе:	
лекции с применением мультимедийных технологий и раздаточным материалом для студентов	4
лабораторные занятия	12
контроль самостоятельной работы	
Самостоятельная работа студента (всего)	92
в том числе:	
внеаудиторная самостоятельная работа при подготовке к лабораторным занятиям	44
выполнение заданий для самостоятельной работы в модульной объектно-ориентированной динамической учебной среде Moodle	42
подготовка к зачету	6
зачет	
<i>Промежуточная аттестация в форме: зачета</i>	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ

Наименование тем (разделов).	Количество академических или астрономических часов по видам учебных занятий			
	Занятия лекционного типа	Лабораторные занятия	Другие виды учебных занятий	Самостоятельная работа обучающихся
Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения. Параметры спектров ЯМР	1	4		25
Тема 2. Химические сдвиги ЯМР ^1H и ^{13}C в органических соединениях	1	4		25

Методы ЯМР спектроскопии в анализе биологически активных веществ	Б1.В.ДВ.01.01		
Тема 3. Спектроскопия ЯМР ^1H и ^{13}C биологически активных веществ	2	4	36
Подготовка к зачету			6
ИТОГО	4	12	92

Тема 1. Физические основы спектроскопии ЯМР высокого разрешения. Параметры спектров ЯМР.

Угловой момент количества движения ядер. Ядра в статическом магнитном поле. Энергия ядер в магнитном поле. Населенности энергетических уровней. Макроскопическое намагничивание. Основные принципы эксперимента ЯМР. СВ-спектрометр. Импульсный метод ЯМР. Классическое описание импульсного эксперимента. Релаксация. Фазовая когерентность. Фурье-преобразование. Накопление спектра. Импульсный спектрометр ЯМР.

Определение химического сдвига. Спин-спиновое взаимодействие. Интенсивности сигналов в спектрах ЯМР на ядрах ^1H и ^{13}C . Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Примеры магнитно-анизотропных эффектов. Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей. Изотопные эффекты.

Тема 2. Химические сдвиги ЯМР ^1H и ^{13}C в органических соединениях.

Химические сдвиги ^1H некоторых органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Альдегиды. Химические сдвиги протонов OH, SH и NH групп. Химические сдвиги ^{13}C некоторых групп органических соединений. Алканы и циклоалканы. Алкены. Арены. Алкины. Аллены. Альдегиды и кетоны. Карбоновые кислоты.

Тема 3. Спектроскопия ЯМР ^1H и ^{13}C биологически активных веществ

Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы. Некоторые примеры диастереотопии. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: а) терпенов, терпеноидов, эфирных масел; б) кумаринов; в) флавоноидов; г) алкалоидов; д) органических кислот; е) стероидов; ж) витаминов; з) дубильных веществ, фенольных соединений; и) пектинов.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Самостоятельная работа по дисциплине имеет своей целью получение необходимых знаний и умений для подготовки к выполнению лабораторных работ при условии самостоятельной работы с литературой (основной и дополнительной) используя ресурсы НОБИ-центра университета, ЭБС, системы управления обучением MOODLE.

Тематика лабораторных работ, порядок выполнения и контроля самостоятельной работы студентов соответствует приведенному в разделе 4 данного документа.

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы

Формирование компетенций «готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований» (ПК-3), «знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования» (ДПК-1), «владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений» (ДПК-2) осуществляется в несколько этапов в соответствии с учебным планом и

планируемыми результатами освоения ОПОП, соотношенными с планируемыми результатами обучения по каждой дисциплине (модулю) и практике.

6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Дескриптор компетенций	Показатели оценивания	Критерии оценивания
готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3)		
Знания	методологических основ физико-химического эксперимента	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий
Умения	выбирать и применять различные методы ЯМР спектроскопии для проведения экспериментальных и научных исследований, для решения конкретных профессиональных задач	
Навыки	расшифровки и интерпретации ЯМР спектров органических веществ	
знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных и токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования (ДПК-1)		
Знания	структуры, строения и свойств биологически активных соединений и инструментальных методов их исследования	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы, тестирования, проверки самостоятельных творческих заданий
Умения	применять метод ЯМР спектроскопии для изучения состава и строения биологически активных соединений	
Навыки	владения методикой определения строения биологически активных соединений с помощью ЯМР спектроскопии	
владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений (ДПК-2)		
Знания	теоретических основ метода ЯМР спектроскопии	Отметка «зачтено» на зачете выставляется, если студент в целом за семестр набрал от 61 до 100 баллов. Контроль и оценка результатов освоения дисциплины осуществляется преподавателем в процессе проведения лабораторных занятий, контрольной работы,
Умения	использовать методы ЯМР спектроскопии для идентификации биологически активных соединений	
Навыки	владения методами статистической обработки результатов измерений с целью оценки точности и надежности измерений анализа и оценки спектральных исследований	

тестирования, самостоятельных заданий	проверки творческих заданий
---------------------------------------------	-----------------------------------

6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Типовые контрольные задания:

1. В ПМР-спектре соединения $C_2H_3Br_3$ имеются следующие сигналы при δ 4,3 (дублет) и 5,9 (триплет). Установите строение вещества.
2. В ЯМР-спектре соединения, имеющего состав $C_2H_4Br_2$, имеется дублет в сильном поле при δ 2,5 м.д. и квартет в слабом поле при δ 5,8 м.д. с соотношением площадей 3:1. Какое строение имеет соединений?
3. Напишите структуры соединений $C_3H_3Cl_5$ (а) и $C_3H_3Cl_3$ (б), которым соответствуют следующие данные ЯМР: а) триплет при δ 4,52 м.д. и дублет δ 6,07 м.д. с соотношением площадей сигнала протона 1:2; б) синглет δ 2,20 м.д. и дублет δ 4,02 м.д. с соотношением площадей пиков 3H : 2H.
4. Определите структурную формулу соединения состава C_7H_8SH , если в спектре ЯМР этого соединения обнаружены сигналы при δ 7,2; 3,27; 2,30 м.д.
5. Предскажите ЯМР-спектры соединений: $CH_3C_6H_4-OCH_2CH_3$ и $C_6H_5CH_2OCH_2CH_3$.
6. Как различить по ЯМР-спектрам толуол, п-ксилол и мезитилен?
7. Соединения $CHCl_2-CHCl_2$ ($\delta = 6,0$ м.д.) и CCl_3-CH_2Cl ($\delta = 3,9$ м.д.) дают в ЯМР-спектрах синглеты. Объясните происхождение синглетов и различия в химических сдвигах.
8. При комнатной температуре циклогексан имеет один пик в ЯМР-спектре. При температуре до $-70^\circ C$ сигнал уширяется, а при $-100^\circ C$ разделяется четко на два пика. Объясните наблюдаемое явление.
9. Исследуемое соединение содержит метильную и метиленовую группы и растворяется в воде, метаноле, этаноле, CCl_4 , $CHCl_3$, бензоле, ацетоне. Какие из названных растворителей следует использовать для записи спектров ЯМР?
10. Как с помощью ЯМР-спектров различить соединения состава $C_2H_3Cl_3$?

Примеры тестовых заданий:

1. Основоположниками ядерного магнитного резонанса являются:
 - 1) М. В. Ломоносов и Д. И. Менделеев;
 - 2) Л. Полинг и А. Байер;
 - 3) Э. Перселл и Ф. Блох;
 - 4) И. Ньютон и Н. Бор.
2. Как расшифровывается аббревиатура ЯМР-спектроскопия?
 - 1) спектроскопия ядерного магнитного резонанса;
 - 2) инфракрасная спектроскопия;
 - 3) масс-спектрометрия;
 - 4) электромагнитная спектроскопия.
3. В ЯМР-спектроскопии определяют:
 - 1) напряженность поля;
 - 2) энергию поля;
 - 3) магнитную восприимчивость;
 - 4) магнитную индукцию.
4. Вклад в константу экранирования, влияющий на значения химического сдвига, обусловлен:
 - 1) парамагнитной составляющей;
 - 2) диамагнитной составляющей;
 - 3) разницей составляющих;

- 4) суммой составляющих.
5. Структура соединения в ЯМР-спектроскопии устанавливается по следующим основным характеристикам:
- 1) мультиплетностью;
 - 2) химическим сдвигом;
 - 3) интегральной интенсивностью;
 - 4) всеми перечисленными.
6. В ПМР-спектре смеси циклогексана, тетраметилсилана и бензола содержатся три пика при $\delta = 0$; 7,27; и 1,4 м. д. Определите, какой сигнал относится к какому растворителю:
- 1) 0 м. д. - циклогексан; 1,4 м. д. - тетраметилсилан; 7,27 м. д. - бензол;
 - 2) 1,4 м. д. - циклогексан; 0 м. д. - тетраметилсилан; 7,27 м. д. - бензол;
 - 3) 7,27 м. д. - циклогексан; 0 м. д. - тетраметилсилан; 1,4 м. д. - бензол;
 - 4) 7,27 м. д. - циклогексан; 7,27 м. д. - тетраметилсилан; 0 м. д. - бензол.
7. Гомоядерной называется система, образованная:
- 1) только протонами;
 - 2) протоном и углеродом;
 - 3) протоном и фтором;
 - 4) протоном и азотом.
8. На качество спектров оказывает влияние следующее свойство растворителя:
- 1) вязкость;
 - 2) показатель преломления;
 - 3) сольватационные свойства;
 - 4) вязкость, сольватационные свойства.
9. В ПМР-спектре наблюдается система сигналов, относящихся к алифатическому соединению: дублет и квартет. Определите сочетание групп:
- 1) $-\text{CH}_2 - \text{CH}_2 -$;
 - 2) $-\text{CH}=\text{CH}_2$;
 - 3) $-\text{CH} - \text{CH}_3$;
 - 4) $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$.
10. Химический сдвиг определяется по формуле:
- 1) $\delta = (\Delta\nu/\nu_0) \cdot 10^6 = (\Delta H/H_0) \cdot 10^6$;
 - 2) $\delta = (\Delta\nu/\nu_0)$;
 - 3) $\delta = (\Delta H/H_0)$;
 - 4) $\delta = (\Delta\nu/\nu_0)/(\Delta H/H_0)$.

Типовые вопросы для самостоятельной проработки:

1. История открытия ядерного магнитного резонанса.
2. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: терпенов, терпеноидов, эфирных масел.
3. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: кумаринов.
4. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: флавоноидов.
5. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: алкалоидов.
6. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: органических кислот.
7. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: стероидов.
8. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: витаминов.
9. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: дубильных веществ, фенольных соединений.
10. Особенности спектров ЯМР основных групп БАВ: пектинов.
11. Применение ЯМР спектроскопии для идентификации наркотических и сильнодействующих веществ.
12. Применение ЯМР спектроскопии для анализа природных объектов.
13. Использование спектроскопии ЯМР в структурном анализе сложных биологических объектов.
14. Возможности применения ЯМР спектроскопии в криминалистике.

15. Обзор технических характеристик ЯМР спектрометров ведущих мировых производителей аналитического оборудования.

Типовые вопросы на зачете:

1. Угловой момент количества движения ядер. Энергия ядер в магнитном поле. Населенности энергетических уровней.
2. Основные принципы эксперимента ЯМР. Импульсный метод ЯМР. Фурье-преобразование.
3. Определение химического сдвига.
4. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигналов. Константы ССВ.
5. Интенсивности сигналов в спектрах ЯМР на ядрах ^1H и ^{13}C .
6. Влияние зарядовой плотности на экранирование. Эффекты соседних групп. Магнитно-анизотропные эффекты соседних групп. Примеры магнитно-анизотропных эффектов.
7. Эффект кольцевого тока. Эффекты электрического поля.
8. Межмолекулярные взаимодействия: водородная связь и эффекты растворителей.
9. Изотопные эффекты.
10. Химические сдвиги в спектрах ЯМР ^1H и ^{13}C основных классов органических соединений: а) алканов и циклоалканов; б) алкенов, алкинов и алленов; в) аренов и гетероциклических соединений; г) альдегидов, кетонов и карбоновых кислот.
11. Химические сдвиги протонов ОН, SH и NH групп.
12. Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы.
13. Особенности спектров ЯМР ^1H и ^{13}C основных групп БАВ: а) терпенов, терпеноидов, эфирных масел; б) кумаринов; в) флавоноидов; г) алкалоидов; д) органических кислот; е) стероидов; ж) витаминов; з) дубильных веществ, фенольных соединений; и) пектинов.

6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

По дисциплине «Методы ЯМР спектроскопии в анализе биологически активных веществ» используется комплекс учебно-методических материалов в электронном виде, выполняющий обучающую, информационно-справочную и контролирующую функции. В качестве контролирующей функции комплекс используется для текущего и промежуточного контроля успеваемости и полностью обеспечивает возможность самостоятельной работы студента по материалам дисциплины.

Лабораторные занятия, реализуемые в соответствии с тематическим планированием дисциплины (раздел 4), обеспечены методическими рекомендациями, представленными в печатном или электронном виде.

Оценка теоретических знаний, умений и навыков, сформированных в процессе выполнения лабораторных работ, осуществляется в форме письменного опроса (составная часть отчета по лабораторной работе), выполнения лабораторных заданий и процесса защиты лабораторной работы. Требования к содержанию отчета по лабораторной работе сформулированы в соответствующем разделе каждой лабораторной работы.

Результаты оценивания сформированности знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций фиксируются в БРС дисциплины, итоговый показатель заносится в зачетно-экзаменационную ведомость дисциплины.

Рейтинговая шкала

<i>Образовательные результаты</i>	<i>Баллы</i>
Тестовый контроль (3 x 5)	15 баллов
Контрольная работа (1 x 10)	10 баллов
Отчет по лабораторным работам (3 x 10)	30 баллов

Задания для СРС (1 x 25)	25 баллов
Количество баллов в семестре:	80 баллов
Количество баллов на зачете:	20 баллов
Баллы	Итоговая оценка
<60	Не зачтено
>61	Зачтено

7. ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Основная литература

1. Васильев, В.П. Аналитическая химия в 2ч. Ч.2. Физико-химические методы анализа [Текст]. М. Высш. школа, 2005г.-351с.

7.2. Дополнительная литература

1. Слепченко, Г. Б. Инструментальный анализ биологически активных веществ и лекарственных средств [Электронный ресурс] / Слепченко Г. Б., Дерябина В. И., Гиндуллина Т. М., и др. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2015. -198с. – Режим доступа: URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=442807>

2. Агишев, А.Ш. Основы квантовой механики и ЯМР-спектроскопии: учебное пособие [Электронный ресурс] / Агишев А.Ш., Шишкина И.П., Агишева М.А. Казань: Издательство КНИТУ, 2013. – 107 с. Режим доступа: URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=258680&sr

3. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса, ч. 1. Вводный курс [Электронный ресурс] М.: Техносфера, 2016. – 292 с. - Режим доступа: URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=444862&sr=1

4. Бельская, Н.П. Ядерный магнитный резонанс. Теория и практика: учебное пособие: В 3 ч., Ч. 2 [Электронный ресурс] / Бельская Н.П., Ельцов О.С. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014. – 125 с. - Режим доступа: URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=275797&sr=1

5. Хребтова, С.Б. Физические методы исследования вещества: задания для самостоятельной работы студентов. Ч. 1. Спектроскопия ЯМР и ЭПР [Электронный ресурс] / Хребтова С.Б., Телешев А.Т., Ярышев Н.Г. М.: Издательство МПГУ, 2015. – 20 с. - Режим доступа: URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=472856&sr=1

Периодические издания:

1. Вестник Московского университета. Серия 2: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Химический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Москва. 1986-2014. URL: <http://www.chemnet.ru/rus/vmgu/welcome.html>.

2. Вестник БГУ. Серия 2: Химия. Биология. География [Электронный ресурс]: сайт / Белорусский государственный университет. Минск. 1973-2014. URL: <http://www.bsu.by/ru/main.aspx?guid=184121>

3. Вестник Пермского университета. Серия: Химия. [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2011-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=32574>.

4. Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: Физика. Химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1969-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9468>.

5. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия [Электронный ресурс]: сайт / Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет). Челябинск. 2009-2014. URL: <http://www2.susu.ac.ru/ru/science/publish/vestnik>.

6. Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия [Электронный

ресурс]: сайт / Сибирский федеральный университет. Красноярск. 2008-2014. URL: <http://journal.sfu-kras.ru/home>.

7. Известия Академии наук. Серия химическая [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 1961-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7833>.

8. Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Физика и химия [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2001-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=38071>.

9. Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2000-2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=9907>.

10. European Reviews of Chemical Research [Электронный ресурс]: сайт / Научная электронная библиотека eLIBRARY. 2014. URL: <http://elibrary.ru/contents.asp?titleid=51199>

8. ПЕРЕЧЕНЬ РЕСУРСОВ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Российское образование [Электронный ресурс]: Федеральный портал. Министерство образования и науки РФ. URL: <http://www.edu.ru>.

2. Федеральный государственный образовательный стандарт [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://standart.edu.ru>.

3. Единое окно доступа к образовательным ресурсам [Электронный ресурс]: информационная система / ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика». - М : [б. и.], 2005. URL: <http://window.edu.ru>.

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: информационный портал / ООО «РУНЭБ», Санкт-Петербургский государственный университет. - М: [б. и.], 2010. URL: www.eLibrary.ru.

5. Российское образование [Электронный ресурс]: федеральный портал / ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика». - М: [б. и.], 2002. URL: www.edu.ru.

6. Руконт [Электронный ресурс]: национальный цифровой ресурс / ООО «Агентство Книга-Сервис». - М: [б. и.], 2011. URL: <http://www.rucont.ru>.

7. Университетская библиотека Online [Электронный ресурс] / ООО "Директ-Медиа" . - М : [б. и.], 2006. URL: www.biblioclub.ru.

8. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://school-collection.edu.ru>.

9. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://fcior.edu.ru>.

10. Российский общеобразовательный портал [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://www.school.edu.ru>.

11. Каталог образовательных ресурсов сети Интернет для школы [Электронный ресурс]: Министерство образования и науки РФ. URL: <http://katalog.iot.ru>.

12. Химия. Первое сентября [Электронный ресурс]: Учебно-методический журнал для учителей химии и естествознания. - М.: Чистые пруды; ИД "Первое сентября". URL: <http://him.1september.ru>.

13. ChemNet Россия [Электронный ресурс]: портал фундаментального химического образования России / МГУ им. М. В. Ломоносова. - М. : [б. и.], 1997. URL: <http://www.chem.msu.su>.

14. Издательство "Просвещение" [Электронный ресурс] : информационный сайт / Изд-во "Просвещение". - М. : [б. и.], 2005-2014. - Загл. с титул. экрана. - Б. ц. URL: <http://www.prosv.ru>

15. Дрофа-Вентана-Граф: объединённая издательская группа. <https://drofa-ventana.ru>.

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекции, читаемые преподавателем, являются основным ориентиром при изучении дисциплины. Методической основой освоения курса является рабочая программа по дисциплине, которую следует использовать для подготовки к лабораторным занятиям и к зачету. Студенту необходимо вести конспекты, в которых необходимо отражать основные понятия, не только на основе лекций, но и на основе работы с основной, дополнительной литературой и интернет-источниками, выполнять задания для самостоятельной работы, предложенные преподавателем.

Для успешного изучения дисциплины преподавателем, работающим со студентами по данному курсу, предлагается использовать разработанный комплекс учебно-методических материалов, включающих:

- лекции в виде презентаций;
- методические материалы для лабораторных занятий с контрольными вопросами и задачами;
- задания для самостоятельной работы студентов;
- для контроля знаний по предмету на лабораторных занятиях разработан комплекс тестовых заданий;
- для контроля знаний и умений предусмотрено проведение контрольных работ.

Варианты тестовых заданий и контрольных работ в печатном виде находятся у преподавателя, ответственного за данную дисциплину.

Основная цель аудиторных занятий по дисциплине состоит в глубоком усвоении наиболее сложных вопросов учебной дисциплины; оказание помощи студенту в изучении, как общетеоретических вопросов, так и в овладении обширным нормативным материалом.

Готовясь к лабораторным занятиям по дисциплине студенту необходимо изучить основную и дополнительную литературу по теме будущего занятия, подвергнуть их анализу, систематизации и обобщению и подготовить план ответа на каждый вопрос, вынесенный на обсуждение, подготовиться к выполнению лабораторной работы, выполнить задания для самостоятельной работы.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ, ВКЛЮЧАЯ ПЕРЕЧЕНЬ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются информационные технологии, охватывающие ресурсы (компьютеры, программное обеспечение и сети), необходимые для управления информацией (создание, хранение, управление, передача и поиск информации):

- технические средства: компьютерная техника и средства связи (ноутбук, проектор, экран, USB-накопители и т.п.);
- коммуникационные средства (проверка домашних заданий и консультирование посредством электронной почты, личного кабинета студента и преподавателя);
- организационно-методическое обеспечение (электронные учебные и учебно-методические материалы, компьютерное тестирование, использование электронных мультимедийных презентаций при проведении лекционных и лабораторных занятий);
- программное обеспечение (Microsoft Office (Excel, Power Point, Word и т.д.), Skype, поисковые системы, электронная почта и т.п.);
- среда электронного обучения ТГПУ им. Л.Н. Толстого <http://moodle.tsput.ru>.

комплект лицензионного программного обеспечения

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Программное обеспечение Microsoft Office XP Professional Win32 Russian– Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
3. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
4. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г.
5. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
6. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 1894-150512-101810 от 12-05-2015 г.

современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал "Информационно-коммуникационные технологии в образовании" <http://www.ict.edu.ru>.
5. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
6. База спектральных данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония. Режим доступа: http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi
7. Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
8. Программное обеспечение: ChemOffice со встроенным генератором спектров ЯМР.

11. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оборудованные мультимедийными средствами обучения.
2. Учебные аудитории для проведения лабораторных занятий.
3. Компьютерные классы с доступом в интернет для работы с информационно-правовыми системами, в том числе «Гарант», и с доступом к электронно-библиотечной системе.
4. Аудитории для самостоятельной работы студентов, оснащенные компьютерной техникой, имеющей доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронной информационно-образовательной среде ТГПУ им. Л.Н. Толстого, внутривузовскому сетевому окружению.

12. АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ.

1. Планируемые результаты обучения при освоении дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения дисциплины у студента должны быть сформированы следующие компетенции:

ПК-3 - готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований;

ДПК-1 - знать теоретические основы токсикологической химии, структуру, строение и свойства биологически активных токсических соединений, а также основные физико-химические методы анализа, применяемые для их исследования;

ДПК-2 - владеть основными физико-химическими методами анализа биологически активных и токсических веществ, основами статистической обработки результатов химического анализа, приемами планирования и синтетического моделирования разнообразных биологически активных соединений.

В результате освоения дисциплины студент должен приобрести:

знания:

- теоретических основ метода ЯМР спектроскопии (ДПК-2);
- структуры, строения и свойств биологически активных соединений и инструментальные методы их исследования (ДПК-1);
- методологических основ химического эксперимента (ПК-3)

умения:

- выбирать и применять различные методы ЯМР спектроскопии для проведения экспериментальных и научных исследований, для решения конкретных профессиональных задач (ПК-3);
- применять метод ЯМР спектроскопии для изучения состава и строения биологически активных соединений (ДПК-1);
- использовать методы ЯМР спектроскопии для идентификации биологически активных соединений (ДПК-2)

навыки:

- навыками расшифровки и интерпретации ЯМР спектров органических веществ (ПК-3);
- методикой определения строения биологически активных соединений с помощью ЯМР спектроскопии (ДПК-1);
- методами статистической обработкой результатов измерений с целью оценки точности и надежности измерений анализа и оценки спектральных исследований (ДПК-2)

2. Место дисциплины в структуре ОПОП.

Дисциплина «Методы ЯМР спектроскопии в анализе биологически активных веществ» является дисциплиной по выбору вариативной части Блока 1 учебного плана.

Освоение данной дисциплины необходимо для формирования готовности студента к осуществлению научно-исследовательской профессиональной деятельности, прохождения практики по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности.

3. Объем дисциплины: 3 зачетные единицы.

4. Образовательный процесс осуществляется на русском языке.

5. Разработчик: доктор химических наук, профессор, зав. кафедрой химии Атрошенко

Ю.М.

13. ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2016-2017 учебный год

В рабочую программу дисциплины внесены изменения в части обновления состава необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 2 от 16 февраля 2017 г.

2017-2018 учебный год

Обновлен состав необходимого комплекта лицензионного программного обеспечения.

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional Russian – Лицензия № 16698685 от 08.08.2003 г.
2. Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian – Лицензия №48497058 от 13.05.2011 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
3. Операционная система Microsoft Windows 10 Professional Russian - контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г., договор № Пр/16/6 от 05 апреля 2016 года.
4. Программное обеспечение Microsoft Office Enterprise 2007 Russian - Лицензия №46138962 от 16.11.2009 г.
5. Программное обеспечение Microsoft Office 2013 Professional - контракт № 405535 от 2 ноября 2015 года, контракт № ПР/ФЕН/15/18 от 23.10.2015 г.
6. Программа для распознавания текста ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition лицензионный сертификат - код позиции AF90-3U1V25-102, ABBYY FineReader 9.0 Corporate Edition Volume License Concurrent от 28 июля 2009 г.
7. Электронный словарь ABBYY Lingvo X3 Европейская версия - Код позиции AL14-2U1V05-102, ABBYY Lingvo x3 Европейская версия. Именная лицензия Concurrent от 28 июля 2009 г.
8. Комплексная Система Антивирусной Защиты Kaspersky Endpoint Security для бизнеса – Стандартный Russian Edition. 500-999 Node 2 year Educational Renewal License – Лицензия № 17E0-170518-102844-823-690 от 18-05-2017 г.

Обновлен состав современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ обучающимся.

1. Компьютерная информационно-правовая система «Гарант» - регистрационный номер клиента 71-70685-000033.
2. Официальный интернет-портал базы данных правовой информации <http://pravo.gov.ru>.
3. Портал Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования <http://fgosvo.ru>.
4. Портал «Информационно-коммуникационные технологии в образовании» <http://www.ict.edu.ru>.
5. Web of Science Core Collection – политематическая реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных <http://webofscience.com>.
6. Полнотекстовый архив ведущих западных научных журналов на российской платформе Национального электронно-информационного консорциума (НЭИКОН) <http://neicon.ru>.
7. Базы данных издательства Springer <https://link.springer.com>.

Изменения к рабочей программе дисциплины утверждены на заседании Ученого совета университета, протокол № 8 от 31 августа 2017 г.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО.

Разработчик:

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность
Атрощенко Юрий Михайлович	Доктор химических наук	Профессор	Заведующий кафедрой химии