

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
_____ А.С. Князев

«*апрель*» 20*22* г.

Рабочая программа дисциплины

Ядерный магнитный резонанс

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане Б1.О.В.ДВ.01.12

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ А.С. Князев

Председатель УМК

_____ В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

– ПК-3. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

ИПК-1.3. Использует современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования.

ИПК-3.1. Анализирует имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагает технические средства для решения поставленных задач.

ИПК-3.2. Производит оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов.

2. Задачи освоения дисциплины

- освоить основные понятия и закономерности ЯМР – спектроскопии.
- научить идентифицировать органические вещества методом ЯМР
- получить базовые навыки определения структуры органического соединения методом ЯМР.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы. Дисциплина входит в модуль Дисциплины (модули) по выбору 1 (ДВ.1).

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: физика, неорганическая химия, физическая химия, строение вещества, органическая химия.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:
-лекции: 12 ч.

-практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Магнитные свойства ядер. Основы метода ядерного магнитного резонанса. Классическая и квантовомеханические модели ЯМР. Условие ЯМР.

Тема 2. Интегральная интенсивность в ПМР-спектрах.

Тема 3. Химический сдвиг. Эмпирические соотношения между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Влияние магнитной анизотропии на химический сдвиг. Аддитивные схемы для химических сдвигов алканов, алкенов, аренов. Влияние растворителя на химический сдвиг.

Тема 4. Спин-спиновое взаимодействие (ССВ), его природа. Мультиплетность сигналов. Константы ССВ.

Тема 5. Классификация спиновых систем. Анализ спектров АВ.

Тема 6. Методы упрощения сложных спектров. Динамические эффекты. Особенности спектров спиртов и соединений, содержащих аминогруппу.

Тема 7. Особенности ЯМР-спектроскопии на других ядрах. Спектроскопия ЯМР ^{13}C , ЯМР ^{19}F .

Тема 8. Двухмерная спектроскопия ЯМР.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, тестов по лекционному материалу, выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет проводится в устной форме по билетам. Билет содержит теоретические вопросы и практические задания. Продолжительность подготовки по билету 1 час.

Примеры билетов компетентностного характера для устного промежуточного контроля (зачет) в аудитории.

Билет № 7.

1. Особенности ПМР-спектров спиртов.
2. Вещество $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_4$ имеет следующий спектр ПМР (8, м.д.): 1,25 (триплет) и 4,4 (квадруплет) с соотношением интенсивностей сигналов 3:2. Установите структуру соединения.
3. Определите структуру вещества $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$ по его ЯМР ^{13}C -спектру (8, м.д.): 13,7 (90), 17,4 (100), 44,7 (98), 210,6 (13).

Билет № 3

1. Магнитная анизотропия бензольного кольца.
2. Каким будет общий вид спектров ПМР дейтерированных аналогов нитроэтана: $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{NO}_2$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$?
3. Установить строение соединения $\text{C}_8\text{H}_{14}\text{O}_2$ по его ЯМР ^{13}C -спектру (8, м.д.): 21,8 (50), 25,5 (60), 23,9 (98), 31,7 (100), 72,5 (55), 170,1 (8), если в DEPT-135 сигнал при 170,1 м.д. не проявляется, сигналы при 50 и 55 м.д. наблюдаются в положительной зоне, остальные сигналы в отрицательной зоне.

Результаты зачета определяются оценками «зачтено», «не зачтено».

По результатам ответа на вопросы билета оценивается сформированность соответствующих компетенций ПК-1, ПК-3.

Вопросы билета оцениваются следующим образом, исходя из максимальных 5 баллов:

1 вопрос – 1,5 балла

2 вопрос – 1,75 балла

3 вопрос – 1,75 балла.

Ответ оценивается по следующей шкале:

2,8 -5 баллов – «зачтено»

Менее 2,8 баллов – «не зачтено».

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=28515>

б) Перечень тем индивидуального задания (темы рефератов)

1. ЯМР-спектроскопия на ядрах P-31;

2. ЯМР-спектроскопия на ядрах N-14;

3. ЯМР-спектроскопия на ядрах B-11;

4. Спектрометры ЯМР;

5. Влияние динамических процессов на спин-спиновое взаимодействие;

6. Шифт реагенты. Применение для упрощения спектров;

7. Спин-решеточная релаксация;

8. Изотопный анализ методом ЯМР;

9. Анализ общего содержания элементов, обладающих магнитным моментом.

в) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Евстигнеев М. П., Лантушенко А. О., Костюков В. В. Основы ЯМР: Учебное пособие. М. : Вузовский учебник, 2015. – 247 с. <https://chem.tsu.ru/sites/default/files/B1>.

2. Устынюк Ю. А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Ч.1 (вводный курс). М. : ТЕХНОСФЕРА, 2016. – 288 с. <https://www.chem.msu.ru/rus/books/ustynyuk>.

б) дополнительная литература:

1. Нифантьев И. Э., Ивченко П. В. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Метод. разработ. МГУ. 2006. – 197 с.

2. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М. : Мир, 1984. – 478 с.

3. Вольвенко Ю. М., Карцев В. Г., Комаров И. В., Туров А. В., Хиля В. П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. М. : Научное партнерство, 2011. – 704 с.

4. Рэй Фримен. Магнитный резонанс в химии и медицине. М. : Красанд, 2009. – 331 с.

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ –
<http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Кравцова Светлана Степановна, канд. хим. наук, доцент, кафедра органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.