

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана

А. С. Князев

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

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

А.С. Князев

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

Томск – 2023

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 и/или производственных 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. Проводит поиск, анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике исследовательской работы

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 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. 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: неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия, физическая 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 квантовомеханическая 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.

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 ЯМР¹³С.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем посещаемости лекций, выполнения заданий к практическим занятиям и выполнения индивидуального задания. 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 теоретический вопрос и практические задания. Продолжительность экзамена 1 час.

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

Билет № 4

1. Особенности ПМР-спектров спиртов.
2. Вещество $C_6H_{10}O_4$ имеет следующий спектр ПМР (δ , м.д.): 1,25 (триплет) и 4,4 (квадруплет) с соотношением интенсивностей сигналов 3:2. Установите структуру соединения.
3. Определите структуру вещества $C_7H_{14}O$ по ЯМР ¹³С-спектру (δ , м.д.): 13,7 (90), 17,4 (100), 44,7 (98), 210,6 (13).

Билет № 8

1. Магнитная анизотропия бензольного кольца.
2. Каким будет общий вид спектров ПМР дейтерированных аналогов нитроэтана: $CH_3CD_2NO_2$ и $CD_3CH_2NO_2$?
3. Установить строение $C_8H_{14}O_2$ по его ЯМР ¹³С-спектру (δ , м.д.): 21,8 (50), 25,5 (60), 23,9 (98), 32,7 (100), 72,5 (55), 170, 1 (8), если в DEPT-135 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 ответов на вопросы билета оценивается сформированность соответствующих компетенций.

Первый вопрос теоретический, проверяющий компетенции ИПК-1.1, ИПК-1.2.

Второй и третий вопросы содержат практические задания, проверяющие компетенции ИПК-1.3, ИПК-3.1, ИПК-3.2.

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

1-ый вопрос – 1 балл

2-ой вопрос – 1,5 балла

3-ий вопрос – 1,5 балла.

Ответ оценивается по следующей шкале:

3-5 баллов – «зачтено»

Менее 3 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).

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/Б1>.

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. – М. : Методическая разработка МГУ, 2006. – 197 с.

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

3. Воловенко 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. Фримен Р. Магнитный резонанс в химии и медицине. – М. : Красанд, 2009. – 336 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

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для проведения защиты индивидуальных заданий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

15. Информация о разработчиках

Кравцова Светлана Степановна, канд. хим. наук, доцент, кафедра органической химии ХФ НИ ТГУ, доцент.