

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана

А. С. Князев

Оценочные материалы по дисциплине

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

К.А. Дычко

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

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 наук.

– 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 наук, применяя взаимодополняющие методы исследования.

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.

Примеры заданий текущего контроля выполнения заданий к семинарам (ПК-1)

Пример: тема семинара «Интегральная интенсивность в ПМР-спектрах».

1. Дать определение интегральной интенсивности, отличие от интенсивности в УФ- и ИК-спектрах.
2. Будет ли отличаться соотношение интенсивностей сигналов этилформиата и диэтилмалоната?
3. В спектре ПМР смеси бензола и циклогексана наблюдаются два синглета при 7,2 и 1,4 м.д. с интегральными интенсивностями 50 и 32 мм. Определите мольные доли компонент.
4. Определить структурную формулу соединения $C_{11}H_{16}$, в ПМР которого имеются три синглета при 0,92; 2,47 и 7,12 м.д. с соотношением интенсивностей сигналов 9:2:5.

Ответы:

Вопрос 2: Нет

Вопрос 3: $m(C_6H_6) = 0,75$; $m(C_6H_{12}) = 0,25$

Вопрос 4: неопентилбензол.

Примерный перечень вопросов индивидуальных заданий (ПК-1; ПК-3).

1. Ядра каких изотопов элементов 7Li , ${}^{32}S$, ${}^{31}P$ обладают собственным магнитным моментом и почему?
2. В системе ПМР смеси галогенпроизводных $C_2H_2Cl_4$ и $C_2H_2Br_4$ имеются два одинаковых по интенсивности синглета. Каковы структуры компонентов и каково их процентное содержание в смеси?

- Используя аддитивные схемы, рассчитать значения химических сдвигов протонов в соединениях: CH_2ClBr ; $m\text{-ClC}_6\text{H}_4\text{NO}_2$.
- Указать мультиплетность сигналов для каждого вида эквивалентных протонов: $^{13}\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{Cl}$.
- Используя номенклатуру А,В...Х, отнести молекулы к тому или иному классу спиновых систем: $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-C}_6\text{H}_5$; $\text{CH}_2=\text{CHBr}$.
- Какому изомеру пентахлорпропана соответствует спектр ПМР, содержащий триплет при δ 4,6 м.д. и дублет при δ 6,05 м.д.?
- В спектре ПМР раствора метанола в D_2O наблюдается один сигнал при δ 3,3 м.д., а в случае раствора в CCl_4 – два сигнала с соотношением интенсивностей 3:1. Объяснить зависимость спектра метанола от растворителя и его чистоты (присутствие следов кислоты).
- Установить строение соединения C_6H_{14} на его ПМР и ЯМР ^{13}C спектрам.

Ответы:

Вопрос 1. ^7Li , ^{31}P .

Вопрос 2. 50%

Вопрос 3. 1-ое 5,68 м.д.; 2-ое: 7,38 м.д., 7,67 м.д., 8,18 м.д., 8,24 м.д.

Вопрос 4. Триплет-квинтет-триплет; дублет триплетов-дублет квадруплетов.

Вопрос 5. 1-ое: $\text{A}_3\text{K}_2\text{X}_2$ и AA'BB' C ; 2-ое: ABX .

Вопрос 6. 1,1,2,3,3 – пентахлорпропан

Вопрос 7. На скорость обмена влияют растворитель и следы кислоты.

Вопрос 8. 2,3– диметилбутан.

3. Оценочные материалы итогового контроля и критерии оценивания

Зачет в третьем семестре проводится в устной форме по билетам. Билет содержит 3 вопроса. Соответствует структуре компетенций дисциплины и позволяет оценивать освоение всех запланированных индикаторов – результатов обучения ИПК-1.1, ИПК-1.2, ИПК-1.3. Продолжительность подготовки по билету – 1 час.

Примеры билетов:

Билет №4

- Особенности спектроскопии ЯМР ^{13}C .
- Определить структуру соединения $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_4$, которому соответствуют следующие параметры ПМР-спектра (δ , м.д.): 1,25 (триплет) и 4,4 (квадруплет) с соотношением интенсивностей сигналов 3:2.
- Каким будет общий вид спектров ПМР дейтерированных аналогов нитроэтана: $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{NO}_2$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$?

Билет №5

- Спин-спиновое взаимодействие, его природа.
- В спектре ПМР соединения $\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}$ обнаружены три сигнала (δ , м.д.): 1,15 (триплет), 4,05 (квадруплет); 7,15 (синглет) с соотношением интенсивностей сигналов 3:2:15. Какова структура вещества?
- По спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C установить структуру соединения $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{O}$.

По результатам ответа на вопросы билета оценивается сформированность компетенций. Компетенции считаются сформированными, если студент усвоил более 60% изучаемого материала. Первый вопрос теоретический, относящийся к компетенции ИПК-

1.1; ИПК-1.2. Второй и третий вопросы содержат практические задания, проверяющие компетенции ИПК-1.3

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».

Информация о разработчиках

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