

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

ЯМР в органической химии

Специальность 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Квалификация (степень) выпускника

Специалист

Форма обучения

Очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины

Дисциплина «ЯМР в органической химии» является компонентом Б1.В.ДВ.1.4. вариативной части учебного плана подготовки по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия».

2. Цель изучения дисциплины (модуля)

Формирование основных понятий, знаний и навыков в работе с методом ЯМР

3. Год/годы и семестр/семестры обучения

5 год, 9 семестр

4. Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, 108 часов, из которых 54 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (36 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – практические занятия), 54 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
(ОПК-2)-2 - владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций СК-3 - владение методиками синтеза анализа и физико-химического исследования органических веществ	У (ОПК-2)-2 Уметь: соотносить ЯМР-спектр со структурой исследуемого органического вещества У 1 (СК-3) – Уметь: анализировать ПМР-спектры первого порядка и высших порядков типа двухспиновой системы АВ 3 1 (СК-3) – Знать: основы метода ЯМР; основные понятия и закономерности метода В 1 (СК-3) – Владеть: базовыми навыками определения структуры органического соединения по его ПМР и ЯМР ¹³ С-спектрам

6. Содержание дисциплины (модуля) и структура учебных видов деятельности**6.1. Структура учебных видов деятельности**

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего (час)	Контактная работа		Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	
1	Основы метода ЯМР	5	4		1
2	Интегральная интенсивность в ПМР-спектрах	8	2	4	1
3	Химический сдвиг. Экранирование ядер в молекулах. Эмпирические соотношения между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Аддитивные схемы.	16	8	4	4
4	Спин-спиновое взаимодействие.	9	6	2	1

	Мультиплетность сигнала. Константы ССВ.				
5	Классификация спиновых систем. Правила анализа ПМР-спектров 1-го порядка.	10	4	4	2
6	Особенности анализа спектров высшего порядка. Спиновая система АВ.	4	2	1	1
7	Способы упрощения ЯМР-спектров. Метод двойного резонанса.	2	2		
8	Изучение динамических процессов с методом ЯМР. Быстрый обмен ядер. Особенности спектров спиртов и аминов.	8	4	2	2
9	Спектроскопия ЯМР ¹³ C	12	4	4	4
	Контрольная работа	4			4
	Индивидуальное задание	18			18
	Зачет	13			13
	Всего	108	36	18	54

6.2. Содержание дисциплины

Основы метода ядерного магнитного резонанса. Магнитный момент ядра и его взаимодействие с магнитным полем. Условие ЯМР. Реализация условий магнитного резонанса. Насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала.

Общая схема ЯМР-спектрометра. Требования к образцу. Интегральная интенсивность линий в ПМР-спектрах. Химический сдвиг. Измерение химических сдвигов. Экранирование ядер в молекулах. Атомная и молекулярная составляющие констант экранирования. Эмпирическое соотношение между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Закономерности химических сдвигов протонов предельных, непредельных, ароматических соединений. Аддитивные схемы. Межмолекулярный вклад в константу экранирования. Внутренние и внешние эталоны. Влияние растворителя на химический сдвиг.

Спин-спиновое взаимодействие (ССВ), его природа. Мультиплетность сигнала. Константы ССВ, их свойства. Геминальные, вицинальные константы ССВ. Константы дальнего ССВ.

Классификация и обозначение спиновых систем. Правила анализа спектров 1 порядка. Особенности анализа ЯМР-спектров высокого разрешения. Расшифровка двухспиновых систем АВ. Способы упрощения спектров. Повышение рабочей частоты прибора, замена растворителя, изотопное замещение. Метод двойного резонанса. Эффект Оверхаузера.

Изучение динамических процессов с помощью ЯМР. Влияние скоростей обменных процессов на форму и положение сигналов.

Особенности ЯМР-спектров спиртов и аминов.

Спектроскопия ЯМР ^{13}C . Экспериментальные аспекты спектроскопии углерода-13. Химические сдвиги. Спин-спиновое взаимодействие ядер углерода-13, ядер углерода-13 с протонами.

6.3 Форма промежуточной аттестации

Зачет

7. Ресурсное обеспечение

Основная литература:

1. Фримен Р. Магнитный резонанс в химии и медицине. – М. : Красанд, 2009. – 336 с.
2. Евстигнеев М. П., Лантушенко А.О., Костюков В.В. Основы ЯМР: учебное пособие. – М. : Вузовский учебник, 2015. – 247 с.

Дополнительная литература:

1. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. – М. : Мир, 1984. – 478 с.
2. Нифантьев И.Э., Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ЯМР. – М. : Методическая разработка, 2006. – 35 с.

Электронные ресурсы:

1. <https://www.khanacademy.org/science/organic-chemistry>
2. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/org.html>
3. <http://e.lanbook.com/books/element.php?p11 cid=25&p11 id=4037>
4. <http://e.lanbook.com/books/element.php?p11 cid=25&p11 id=3155>

8. Преподаватель

Автор, кандидат химических наук, доцент С.С. Кравцова.