

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Ядерный магнитный резонанс**

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
**Химические и физические методы исследований в экологической и
криминалистической экспертизе**

Квалификация выпускника
Магистр

Форма обучения
Очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины:

Б1.В.ДВ.4.2. «Ядерный магнитный резонанс».

2. Цель изучения дисциплины:

освоение основ метода ЯМР и формирование навыков в исследовании структуры органических веществ методом ЯМР-спектроскопии.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения: 1 год, 1 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет: 2 зачетные единицы, 72 часа, из которых 16 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (6 часов – занятия лекционного типа, 10 часов – практические занятия), 56 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

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

| Формируемые компетенции | Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю) |
|---|---|
| <p>Первый уровень (пороговый) (ОПК-2) – I владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.</p> | <p>У (ОПК-2) – I Уметь: осуществлять расчет результатов анализа с использованием базы спектральных данных и проводить интерпретацию ЯМР-спектров.</p> |
| <p>Второй уровень (углублённый) (ОПК-3) – II способность реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях.</p> | <p>З (ОПК-3) –II Знать: содержание основные нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях. В (ОПК-3)–II Владеть: навыками проведения химического эксперимента с соблюдением норм техники безопасности в лабораторных и технологических условиях.</p> |
| <p>Первый уровень (пороговый) (ПК-1) – I – способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты.</p> | <p>У (ПК-1) – I Уметь: самостоятельно планировать исследования и получать новые научные и прикладные результаты</p> |
| <p>Первый уровень (пороговый) (ПК-2) – I – владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии.</p> | <p>З (ПК-2) – I Знать: физические основы метода ядерного магнитного резонанса и возможности его применения для решения аналитических задач.</p> |
| <p>Первый уровень (пороговый) (ПК-3) – I - готовность использовать современную</p> | <p>У (ПК-3) – I Уметь: идентифицировать органические вещества методом ЯМР.</p> |

| | |
|---|---|
| аппаратуру при проведении научных исследований. | З (ПК-3) – I – Знать: основные понятия и закономерности ЯМР-спектроскопии. В (ПК-3) – I Владеть: базовыми навыками определения структуры органического соединения методом ЯМР. |
|---|---|

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 (час) | | Самостоятельная работа |
|---------------|--|-------------|-------------------------|----------------------|------------------------|
| | | | Лекции | Практические занятия | |
| 1 | Основы метода ЯМР | 8,5 | 0,5 | | 8 |
| 2 | Интегральная интенсивность в ПМР-спектрах | 12,5 | 0,5 | 4 | 8 |
| 3 | Химический сдвиг. Эмпирические соотношения между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Аддитивные схемы. | 18 | 2 | 2 | 14 |
| 4 | Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигнала. Константы ССВ. | 16 | 2 | 2 | 12 |
| 5 | Особенности ЯМР-спектроскопии на других ядрах. Спектроскопия ЯМР ¹³ C | 17 | 1 | 2 | 14 |
| Итого: | | 72 | 6 | 10 | 56 |

6.2 Содержание дисциплины

Основы метода ядерного магнитного резонанса. Магнитный момент ядра и его взаимодействие с магнитным полем. Условие ЯМР.

Интегральная интенсивность линий в ПМР-спектрах. Химический сдвиг. Измерение химических сдвигов. Эмпирические соотношения между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Закономерности химических сдвигов протонов предельных,

непредельных, ароматических соединений. Аддитивные схемы. Влияние растворителя на химический сдвиг.

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

Особенности ЯМР-спектроскопии на других ядрах. Спектроскопия ЯМР¹³С. Экспериментальные аспекты спектроскопии на ядрах углерода-13. Химические сдвиги. Спин-спиновое взаимодействие.

6.3 Форма промежуточной аттестации: зачет.

7.Ресурсное обеспечение

7.1. 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.

7.2. Дополнительная литература:

1. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии (растворы и жидкости) /М. А. Федотов – М.: Физматлит, 2009. –386 с.
2. Нифантьев И.Э., Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ЯМР. – М.: Методическая разработка, 2006. – 35 с.

7.3. Электронные ресурсы:

1. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР / Перевод с англ. Ю. А. Устынюка, Н. М. Сергеева Гюнтер, Харальд/ –М.: Мир, 1984. –478 с. [Электронный ресурс] <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000083588/000083588>
2. Mayboroda O.A. On nuclear magnetic resonance, metabolomics and "metabolic individuality" /O. A. Mayboroda, E. Nevedomskaya Вестник Том. Гос. Ун-та. Химия 2015 № 1. С. 61-64 [Электронный ресурс] <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000514578>
3. Базыль О.К. Физические методы исследования в химии : учебное пособие /О. К. Базыль; –Томск: Изд-во Том. гос. ун-та, 2013. –85 с. [Электронный ресурс] <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000457156>

8. Автор: Кравцова Светлана Степановна, канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии ХФ ТГУ.