

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Ядерный магнитный резонанс**

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация (степень) выпускника
магистр

Форма обучения
очная

Томск 2016

1. Код и наименование дисциплины
Б1.В.ДВ.2.4. Ядерный магнитный резонанс

2. Цель изучения дисциплины освоение основ метода ЯМР на различных ядрах и формирование навыков в исследовании структуры органического вещества методом ЯМР-спектроскопии.

3. Год и семестр обучения
2 год, 3 семестр

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – практические занятия), 72 часа составляет самостоятельная работа обучающегося, в т.ч. 36 часов подготовка к экзамену.

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

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-3 – П Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	В (ПК-3) – П Владеть: базовыми навыками определения структуры органического соединения методом ЯМР
СПК-4 – П способность проводить направленный синтез органических соединений с полезными свойствами и исследовать структуру и реакционную способность органических соединений	У (СПК-4) – П Уметь: анализировать ЯМР-спектры органических соединений З (СПК-4) – П Знать: основы метода ЯМР на различных ядрах

6. Содержание дисциплины 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	3	2		1
2	Интегральная интенсивность в ПМР-спектрах	4	1	2	1
3	Химический сдвиг. Экранирование ядер в молекулах. Эмпирические соотношения между химическим сдвигом и молекулярной структурой. Аддитивные схемы	9	5	2	2
4	Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность сигнала. Константы ССВ.	6	2	2	2
5	Классификация спиновых систем. Правила анализа ПМР-спектров 1-го порядка	8	2	4	2

6	Особенности анализа ПМР-спектров высшего порядка. Способы упрощения ЯМР-спектров. Метод двойного резонанса	5	1	2	2
7	Изучение динамических процессов методом ЯМР. Особенности спектров спиртов и аминов	6	2	2	2
8	Спектроскопия ЯМР ^{13}C	8	2	4	2
9	Особенности ЯМР-спектроскопии на ядрах: фтор-19, фосфор-31, азот-14	3	1		2
Контрольная работа		2			2
Индивидуальное задание		18			18
Экзамен		36			36
Всего		108	18	18	72

6.2. Содержание дисциплины

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

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.

Особенности ЯМР-спектроскопии на ядрах: фтор-19, фосфор-31, азот-14.

6.3 Форма промежуточной аттестации

Экзамен

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. [1. https://www.khanacademy.org/science/organic-chemistry](https://www.khanacademy.org/science/organic-chemistry)
2. [2. http://ido.tsu.ru/schools/chem/lib/chem/umk/org/index.php](http://ido.tsu.ru/schools/chem/lib/chem/umk/org/index.php)
3. [3. http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/org.html](http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/org.html)
4. [4. http://orgchem.tsu.ru/](http://orgchem.tsu.ru/)
5. [5. http://e.lanbook.com/books/element.php?p11 cid=25&p11 id=4037](http://e.lanbook.com/books/element.php?p11 cid=25&p11 id=4037)
6. [6. http://sun.tsu.ru/limit/2016/000049461/000049461.djvu](http://sun.tsu.ru/limit/2016/000049461/000049461.djvu)
7. [7. http://e.lanbook.com/books/element.php?p11 cid=25&p11 id=3155](http://e.lanbook.com/books/element.php?p11 cid=25&p11 id=3155)

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