

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук



СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.

Подпись

5 октября 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАГНИТНАЯ РАДИОСПЕКТРОСКОПИЯ

направление подготовки: 04.03.01 Химия
направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:
д.х.н. Талзи Е. П..

Зав. каф. катализа и адсорбции
академик Бухтияров В.И.

Руководитель программы:
д.х.н., доц. Емельянов В.А.

Новосибирск, 2020

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	3
3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	4
5. Перечень учебной литературы	5
6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	6
7. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	6
8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	6
9. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.....	7

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
Б-ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Б-ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений	- имеет ясное представление о той информации о строении и свойствах химических соединений, которую можно надёжно извлечь с использованием магнитной радиоскопии, об ограничениях метода и причинах возможных ошибок при интерпретации.
Б-ОПК-5. Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Б-ОПК-5.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	- осуществляет с помощью соответствующего программного обеспечения теоретическую симуляцию спектров ЯМР и ЭПР для контроля правильности интерпретации экспериментальных спектров.
Б-ПК-5. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления состава, структуры и реакционной способности известных и новых соединений и материалов	Б-ПК-5.2. Исследует реакционную способность соединений и материалов с применением современных экспериментальных и расчётных методов	-имеет представление о современных методах, позволяющих детектировать и изучать строение и реакционную способность стабильных и неустойчивых реакционных интермедиатов, ведущих каталитические превращения.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины
«МАГНИТНАЯ РАДИОСПЕКТРОСКОПИЯ»

»:

- Химическая кинетика
- Физическая химия
- Физика
- Математический анализ
- Высшая алгебра
- Строение вещества
- Неорганическая химия;
- Координационная химия;
- Органическая химия;

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо для освоения дисциплины «МАГНИТНАЯ РАДИОСПЕКТРОСКОПИЯ»:

- Современная техника каталитического эксперимента
- Катализ
- Учебная практика, ознакомительная практика
- Производственная практика, научно-исследовательская работа

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу. Всего 36 академических часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)								Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)				
				Лекция	Семинарские занятия	Практические занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Домашние задания	Самост. работа	Зачет	Экзамен	Дифференцированный зачет			
1	ЭПР спектроскопия	8	1	3						1						
2	Импульсная ЯМР спектроскопия	8	2	3						1						
3	Перенос поляризации. Двумерная ЯМР спектроскопия	8	3	3						1						
4	ЯМР твёрдого тела. Эффект Оверхаузера.	8	4	3						1						
5	Лабораторные работы ЭПР	8	9			8				2						
6	Лабораторные работы ЯМР		10			4				2						
7	Зачёт	8	11							2	2					
Всего:				12		12				10	2					Всего 36 ч

Реализация дисциплины включена в практическую подготовку в ИК СО РАН при проведении следующих видов занятий, часть из которых предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью:

- лекции;
- практические занятия.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

8 семестр
Лекции (12 ч)

Магнитная радиоспектроскопия	Объем, час
------------------------------	------------

Электронный и ядерный магнитные моменты.. Ядра в магнитном поле. Интенсивность сигнала ЯМР. Электронное экранирование (химический сдвиг). Спин-спиновое взаимодействие.	2
Электронный парамагнитный резонанс. Спин-гамильтониан. Сверхтонкое взаимодействие. Интерпретация спектров ЭПР жидких и замороженных растворов парамагнитных центров с одним неспаренным электроном $S = \frac{1}{2}$.	2
Импульсная ЯМР спектроскопия. Векторная модель ЯМР. Химические сдвиги и спин-спиновое взаимодействие в импульсном эксперименте. Спиновое эхо. Измерение T_1 и T_2 .	2
Спиновая релаксация. Механизмы релаксации. Детектирование и регистрация ЯМР сигналов. Декаплинг (развязка). Редактирование спектров с помощью спинового эха.	2
Перенос поляризации.. Эффект Оверхаузера. . Введение в методы двумерной ЯМР спектроскопии.	2
ЯМР твёрдого тела.	2

Практические занятия (12 ч)

Содержание практического занятия	Объем, час
Занятие 1. Запись и обработка спектров ЯМР	4
Занятие 2. Запись и обработка спектров ЭПР	4
Занятие 3. Симулирование спектров ЭПР и консультация по заданиям из билетов итогового зачёта	4

Самостоятельная работа студентов (20 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
закрепление, обобщение и повторение пройденного учебного материала	7
уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях	5
подготовка к зачету	8

Формы организации учебного процесса: лекция, лабораторная работа, самостоятельная работа студента, консультации, дифференцированный зачёт.

5. Перечень учебной литературы

1. Резвухин А. И. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса высокого разрешения. Новосибирск: Изд. НГУ, 1979.
2. Кэррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1973.
3. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
4. Степанов А. Г., Талзи Е. П. ЯМР-спектроскопия. Новосибирск: Изд. НГУ, 1997.
5. Степанов А. Г., Талзи Е. П. Практикум по физической химии. ЯМР спектроскопия. 2002
6. Брыляков К. П. Основы импульсной ЯМР спектроскопии: Изд. НГУ, 2002.

7. Талзи Е. П. Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе (курс лекций)
Издательский отдел Института, Новосибирск 2002 год.

6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

6.1 Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС, электронную почту.

6.2 Современные профессиональные базы данных:

Не используются.

7. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

7.1 Перечень программного обеспечения

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

7.2 Информационные справочные системы

Не используются.

8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины «Магнитная радиоспектроскопия» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и , промежуточной аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

3. Для знакомства студентов с устройством спектрометров ЭПР и ЯМР и базовыми принципами грамотного и бережного их использования будет прочитана короткая (20-30 мин) вводная демонстрационная лекция на базе имеющегося в ИК СОРАН и НГУ оборудования.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

9. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Дифференцированный зачет проходит в устной форме по билетам. В каждый билет включены два теоретических вопроса и одна практическая задача.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Магнитная радиоспектроскопия»

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
Б-ПК-5. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления состава, структуры и реакционной способности известных и новых соединений и материалов	Б-ПК-5.2. Исследует реакционную способность соединений и материалов с применением современных экспериментальных и расчётных методов	-имеет представление о современных методах, позволяющих детектировать и изучать строение и реакционную способность стабильных и неустойчивых реакционных интермедиатов, ведущих каталитические превращения.	Дифференцированный зачет, проверочная работа

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p align="center"><u>Дифференцированный зачет:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - Демонстрирует знания основных определений, используемых в курсе Магнитная радиоспектроскопия, - знает физические основы методов ЯМР и ЭПР, диапазон применимости и основные ограничения. - имеет представление об основных принципах двумерной ЯМР спектроскопии - умеет интерпретировать спектры ЭПР поликристаллических образцов соединений с одним неспаренным электроном $S = 1/2$ - аргументированно выбирает объекты для их изучения методами ЯМР и ЭПР - имеет представление об особенностях ЯМР спектроскопии твёрдого тела 	<i>Отлично</i>
<p align="center"><u>Дифференцированный зачет</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - Демонстрирует знания основных определений, используемых в курсе Магнитная радиоспектроскопия, - знает физические основы методов ЯМР и ЭПР, диапазон применимости и основные ограничения. - имеет представление об основных принципах двумерной ЯМР спектроскопии 	<i>Хорошо</i>

<ul style="list-style-type: none"> – умеет без грубых ошибок интерпретировать спектры ЭПР поликристаллических образцов соединений с одним неспаренным электроном $S = 1/2$ – аргументированно выбирает объекты для их изучения методами ЯМР и ЭПР 	
<p style="text-align: center;"><u>Дифференцированный зачет</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – Демонстрирует знания основных определений, используемых в курсе Магнитная радиоспектроскопия, – знает физические основы методов ЯМР и ЭПР, нечётко представляет диапазон применимости и основные ограничения методов. – имеет представление об основных принципах двумерной ЯМР спектроскопии – умеет с существенными ошибками интерпретировать спектры ЭПР поликристаллических образцов соединений с одним неспаренным электроном $S = 1/2$ 	<i>Удовлетворительно</i>
<p style="text-align: center;"><u>Дифференцированный зачет</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – Имеет представление об основных определениях, используемых в курсе Магнитная радиоспектроскопия, – демонстрирует неполное знание или допускает грубые ошибки при изложении материала по основным разделам курса, – отсутствие ответов на дополнительные вопросы 	<i>Неудовлетворительно</i>

Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примерные теоретические вопросы к зачету:

1. Что такое g-фактор, что такое химический сдвиг. Анизотропия g-фактора и химического сдвига. Характерные g-фактора для радикалов и комплексов переходных металлов с $S = 1/2$.
2. Форма линий ЭПР и ЯМР поликристаллических образцов. Определение главных значений тензора химического сдвига и g-фактора из экспериментальных спектров.
3. Связь величины g-фактора с параметрами расщепления d –орбиталей в кристаллическом поле и константой спин орбитального взаимодействия.
4. Уравнение Блоха. Что такое T_1 и T_2 . Почему сигнал ЯМР имеет лоренцеву форму с шириной $1/T_2$.
5. Эффект Оверхаузера. Величина эффекта. Как из данных по эффекту Оверхаузера определить структуру молекулы.
6. Что такое декаплинг.
7. Что такое 90° импульс. Как часто и как долго необходимо оцифровывать спад свободной индукции. Измерение T_1 и T_2 .
8. Перенос поляризации. Селективный перенос поляризации. Процедура INEPT,

- объяснить на векторной модели принципы работы.
9. Как с помощью J – модуляции различить CH_2 и CH атомы углерода.
 10. Основные принципы двумерной J - спектроскопии и двумерной корреляционной спектроскопии. Уметь анализировать простые спектры.
 11. Вращение под магическим углом. Для чего нужно вращение и какова должна быть его скорость.
 12. Кросс-поляризация. Соотношение Хартмана Хана.

Примерные типы задач, решаемых на зачете:

(1) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.06$; $g_3 = 2.06$; $A_1 = 50 \text{ G}$, $A_2 = 50 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 1$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(2) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.06$; $g_3 = 2.25$; $A_1 = 0 \text{ G}$, $A_2 = 0 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 1/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(3) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 1.96$; $g_3 = 2.25$; $A_1 = 0 \text{ G}$, $A_2 = 0 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 3/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(4) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.00$; $g_3 = 2.29$; $A_1 = 0 \text{ G}$, $A_2 = 0 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 5/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

(5) Построить спектры ЭПР раствора и замороженного раствора по следующим параметрам: $g_1 = 1.96$; $g_2 = 2.25$; $g_3 = 2.25$; $A_1 = 0 \text{ G}$, $A_2 = 0 \text{ G}$; $A_3 = 80 \text{ G}$; одно магнитное ядро со 100% природным содержанием и спином $I = 7/2$. Как изменятся спектры, если природное содержание магнитного ядра 10%.

