

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

РЕЗОНАНСНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Рекомендуется для направления подготовки

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

1. Цели и задачи дисциплины:

Основной целью курса является ознакомление учащихся с основами ЭПР и ЯМР спектроскопии. Изучение резонансных методов является необходимым в подготовке современного специалиста в химии. Это обусловлено широким применением этих методов в научных исследованиях и на практике. В данном курсе магнитным резонансным методам уделяется внимание с точки зрения эффективного их применения в анализе неорганических объектов.

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО:

Дисциплина «Резонансные методы в химии» относится к вариативной части блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 «Химия» и является дисциплиной модуля 2 по выбору.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений НИР Экспериментальные методы исследования в химии	Актуальные задачи современной химии Рентгендифракционные методы в неорганической химии Физические методы исследования веществ и материалов Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	Актуальные задачи современной химии Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР	Актуальные задачи современной химии Рентгендифракционные методы в неорганической химии Физические методы исследования веществ и материалов Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в

		химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
М-ПК-2-н Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Актуальные задачи современной химии Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР	Актуальные задачи современной химии Рентгендифракционные методы в неорганической химии Физические методы исследования веществ и материалов Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе Применение ПО в неорганическом эксперименте Термоаналитические методы в химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

- **Знать:** основы методов электронной парамагнитной и ядерной магнитной резонансной спектроскопии, применение их в неорганической химии (компетенции технику и методики спектрального эксперимента).
- **Уметь:** ориентироваться в возможностях и ограничениях спектральных методов и выбирать рациональные методы исследования изучаемых объектов (компетенции; анализировать и интерпретировать спектры неорганических и комплексных соединений).
- **Владеть:** методиками подготовки образцов для спектральных исследований, обработки и анализа спектров.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **4** зачетных единиц.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		2			
Аудиторные занятия (всего)	48	48			
В том числе:					
Лекции	16	16			
Практические занятия (ПЗ)					
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	32	32			
Самостоятельная работа (всего)	96	96			
Общая трудоемкость	час	144	144		
	зач. ед.	4	4		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)
1.	Спектроскопия ЭПР	Физические основы метода ЭПР. Условия возникновения резонанса. Правила отбора. Релаксация. Представление спектра ЭПР, физический смысл параметров спектра ЭПР. Положение, интенсивность, ширина и форма линий. Анизотропия g-фактора. Спектры ЭПР радикалов с одним неспаренным электроном. Спектры ЭПР катионов переходных металлов. Расщепление в нулевом поле, тонкая структура спектров ЭПР. Природа сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Константы СТВ. Применение ЭПР в неорганической химии. Принципы работы спектрометров. Приготовление проб. Выбор условий регистрации спектров. Расшифровка спектра ЭПР.

2.	Спектроскопия ЯМР	<p>Характеристика атомов по ядерным спинам. Взаимодействие ядерного спина с внешним магнитным полем. Условия получения спектров ЯМР. Понятие о релаксации. ЯМР различных ядер. Химический сдвиг. Шкалы химических сдвигов. Внутримолекулярные факторы, влияющие на химсдвиг.</p> <p>Спин-спиновое взаимодействие (ССВ): число компонентов, константы ССВ, относительная интенсивность компонентов мультиплета. Двойной резонанс.</p> <p>Особенности ЯМР на ядрах ^{13}C, ^{19}F, ^{31}P, ^{59}Co, ^{195}Pt.</p> <p>Идентификация веществ по спектрам ЯМР, определение структуры, изучение механизмов и кинетики реакций.</p> <p>Принципы работы спектрометров. Приготовление образцов для записи спектров: растворители, стандарты, концентрации. Анализ спектра ЯМР: отнесение сигналов химсдвигов, анализ спин-спинового расщепления.</p>
----	--------------------------	---

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Сем ин	СРС	Всего час.
1.	Спектроскопия ЭПР	8		16		43	72
2.	Спектроскопия ЯМР	8		16		43	72
	Всего	16		32		96	144

6. Лабораторный практикум

№ раздела	Наименование лабораторных работ	Трудо-емкость (час.)
1	Условия возникновения резонанса	2
1	Приборы, применяемые в ЭПР спектроскопии. Приготовление проб.	2
1	Характеристики спектров ЭПР	2
1	Спектры ЭПР радикалов	2
1	Спектры ЭПР катионов переходных металлов	2
1	Сверхтонкое взаимодействие.	2
1	Анизотропия g-фактора.	2
1	Определение строения вещества по спектрам ЭПР.	2
2	Приборы, применяемые в ЯМР спектроскопии	3
2	Приготовление образцов для записи спектров ЯМР: растворители, стандарты, концентрации.	3

2	Характеристики спектров ЯМР.	3
2	Определение строения вещества по спектрам ЯМР	3
2	Моделирование спектров ЯМР неорганических веществ. Расшифровка спектров ЯМР	4
	Всего	32

7. Практические занятия (семинары)

Не предусмотрены учебным планом.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

1. Лекционная аудитория с мультимедийным проектором.
2. Лаборатория для проведения научно-исследовательских работ.
3. Компьютеры для проведения вычислений, обработки результатов и доступа к информационным системам.

9. Информационное обеспечение дисциплины

а) программное обеспечение

Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions (EES)

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

НАЗВАНИЕ РЕСУРСА	ОПИСАНИЕ РЕСУРСА	АДРЕС ДОСТУПА
eLIBRARY	Крупнейшая в России электронная библиотека научных публикаций, обладающая богатыми возможностями поиска и получения информации.	http://elibrary.ru
en.edu.ru	Портал является составной частью федерального портала "Российское образование". Содержит ресурсы и ссылки на ресурсы по естественно-научным дисциплинам (физика, химия и биология)	http://www.en.edu.ru/
ChemNet	Химическая информационная сеть. Информация о химических факультетах, вузах, ассоциациях. Электронная библиотека. Базы данных по химии..	http://www.chem.msu.su/
Chemport.ru -	Химический портал. Новости химии, работа для химиков, форум и др. материалы.	http://www.chemport.ru
elementy.ru	Портал о фундаментальной науке	http://www.elementy.ru .
NIST Chemistry WebBook	База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений.	http://webbook.nist.gov/chemistry/
XuMuk.ru	сайт о химии для химиков. Химическая энциклопедия, фармацевтические справочники, методики синтеза и другие полезные материалы он-лайн	http://www.xumuk.ru/
ChemInfo	Каталог химических информационных ресурсов (англ.) Сайт создан для того, чтобы	www.cheminfo.org .

	помочь в поиске химической информации в Интернете (Indiana University) From this webpage you will be able to try many applications using the open source project Visualizer	
Spectroscopy Now	Сайт для химиков-спектроскопистов. Содержит обширные базы данных спектров, программы идентификации соединений и много других интересных ресурсов (англ.).	http://www.spectroscopynow.com
AIST Spectral Database for Organic Compounds SDBS	База данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония.	http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

а) основная литература

1. Драго Р. Физические методы в химии. Т.1. М.: Мир, 1981.

2. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков, Физические методы исследования в химии,- М., Мир, 2003. ; М.: Мир, 2006.

б) дополнительная литература

1. Пентин Ю.А, Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии: учеб. пособие М.: Мир: БИНОМ. Лаб. Знаний, 2008

2. Зайцев Б.Е., Ковальчукова О.В., Страшнова С.Б. Применение ИК-спектроскопии в химии. М., РУДН, 2008, 150 с.

<http://lib.rudn.ru/MegaPro2/Download/MObject/1574/Zaicev%20B.E.pdf>

3. Устынюк Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Часть 1 (вводный курс). М.: Техносфера, 2016.

<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/ustyniuk-nmr-lectures/>

4. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости. М.: Физматлит, 2009.

<http://bookre.org/reader?file=1471699&pg=131>

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

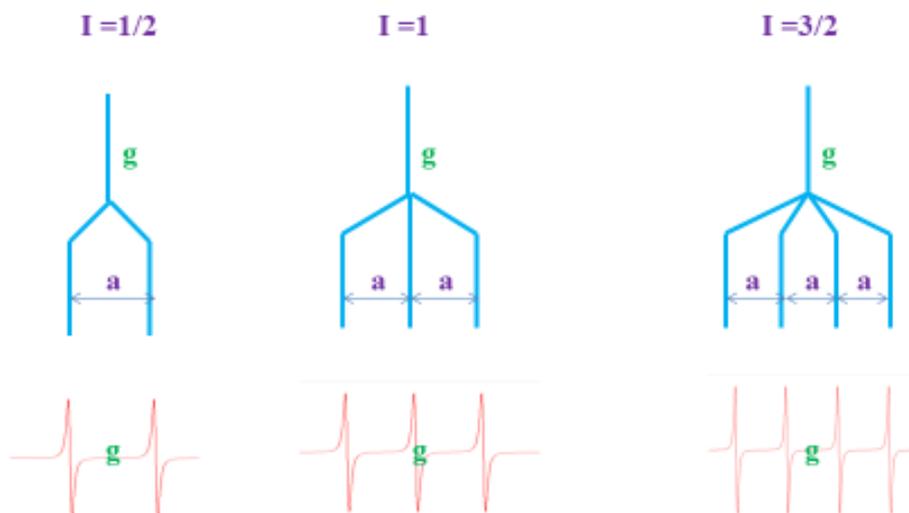
Представлены на сайте <http://esystem.pfur.ru/course/view.php?id=5760>

Например:

Моделирование спектров ЭПР

Относительная интенсивность линий

1 ядро **$2I + 1$ линия** **Интенсивности одинаковые**



Если расщепляющее ядро представлено магнитными и немагнитными изотопами элемента, спектр будет состоять из мультиплетов с наложенными на них одиночными линиями с интенсивностями, соответствующими природному содержанию изотопов.

Соль Cr^{V} (d^1) **1 e** **дает спектр ЭПР**

90% ^{52}Cr ($I = 0$)

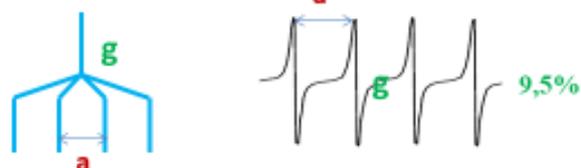
нет СТС



9,5% ^{53}Cr ($I = 3/2$)

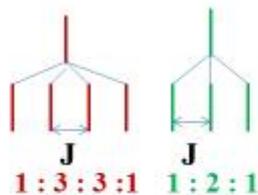
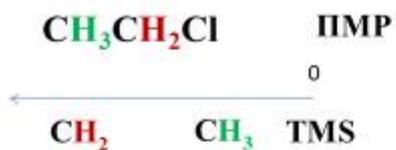
есть СТС

число линий $2 \cdot 3/2 + 1 = 4$



интенсивность одинаковая

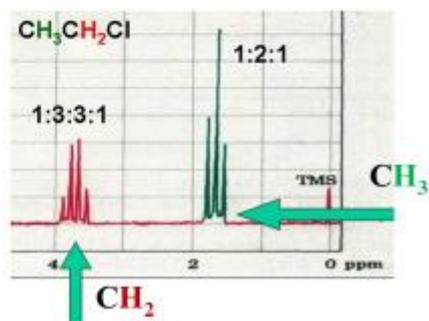
Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ЯМР



сигнал CH_2 расщепляется за счет взаимодействия с **3** ядрами атомов водорода CH_3 группы на $2 \cdot 3 \cdot 1/2 + 1 = 4$ компонента (квадруплет)

сигнал CH_3 расщепляется за счет взаимодействия с **2** ядрами атомов водорода CH_2 группы на $2 \cdot 2 \cdot 1/2 + 1 = 3$ компонента (триплет)

относительная интенсивность компонент в мультиплете определяется из треугольника Паскаля



12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Резонансные методы в химии» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

доцент кафедры неорганической химии



О.В. Рудницкая

Руководитель программы

Профессор кафедры органической химии



Варламов А. В.

Заведующий кафедрой
неорганической химии



В.Н. Хрусталев