

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий



УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – пер-
вый проректор

Хагуров Т.А.

подпись

24

04

2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Б1.В.ДВ.07.02 ЯМР- И ЭПР- СПЕКТРОСКОПИЯ
НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ
СОЕДИНЕНИЙ**

Направление подготовки/специальность 04. 03.01 Химия

Направленность (профиль)/ специализация - неорганическая химия и хи-
мия координационных соединений

Программа подготовки академическая

Форма обучения очная

Квалификация (степень) выпускника бакалавр

Краснодар 2018

Рабочая программа дисциплины ЯМР- И ЭПР- СПЕКТРОСКОПИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.03.01 – Химия (профиль Неорганическая химия и химия координационных соединений) №210 от 12 марта 2015 г. (Зарегистрирован в Минюсте 07 апреля 2015 г. № 36766)

Программу составил

Волынкин В.А., доцент кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, к.х.н. 

Рабочая программа дисциплины ЯМР- И ЭПР-СПЕКТРОСКОПИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии протокол № 8 «10» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой (разработчика)
д.х.н., профессор Буков Н.Н. 

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры (выпускающей)
протокол № 8 «10» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой (выпускающей)
д.х.н., профессор  Буков Н.Н.

Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий

протокол № 5 «20» апреля 2018 г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П. 

Рецензенты:

Крапивин Г.Д, профессор кафедры биоорганической химии ФГБОУ ВО «КубГТУ», д.х.н., профессор

Болотин С.Н, доцент кафедры экологии и природопользования ФГБОУ ВО «КубГУ», к.х.н, доцент

**Рабочая программа учебной дисциплины
«ЯМР- и ЭПР- спектроскопия неорганических и
координационных соединений»
для студентов факультета химии и высоких технологий
направление подготовки 04.03.01 – Химия**

1. Цели и задачи освоения дисциплины

1.1. Цель дисциплины:

Обучить студентов владению современными методами исследования ЯМР и ЭПР спектроскопии, освоить основные приемы работы и принципы исследования комплексных соединений, подготовить к самостоятельному решению практических задач в данной области от постановки задачи и планирования эксперимента до получения конечного результата.

1.2. Задача дисциплины:

- знакомство студентов с основными методами исследования комплексных соединений, обработки результатов спектроскопических исследований, принципами планирования эксперимента, моделирования спектров сложных равновесных систем.
- студенты должны познакомиться с современными методами, научным оборудованием и программным обеспечением. Уметь активно применять современные методы исследования в профессиональной сфере.

1.3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Курс «ЯМР- и ЭПР- спектроскопия неорганических и координационных соединений» относится к вариативной части Блока Б1 «Дисциплины (модули)» (Б1.В.ДВ.07.02). Для его изучения используются знания курсов Б1.Б.10 «Физические методы анализа» и Б1.Б.07 «Физика». Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при изучении специальных профильных дисциплин, таких как «Направленный синтез неорганических и координационных соединений», «Супрамолекулярная химия», «Методы исследования неорганических и композитных материалов» а также в научно-исследовательской работе студентов.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам (ПК-1);
- владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований (ПК-2);
- владением системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ОПК-3	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности	Основные принципы ядерного магнитного резонанса и электронного парамагнитного резонанса	Использовать знания о природе и особенностях изучаемых ядер, выбирать оптимальные параметры проведения эксперимента	Основными приемами получения спектров в соответствии со свойствами изучаемых материалов
2	ПК-1	способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Основные методики подготовки образцов и проведения анализа.	Проводить подготовку образцов и выполнять анализ для образцов различного типа.	Методикой подготовки образцов и выполнения анализа для образцов различного типа.
3	ПК-2	владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Основные части современных спектрометров ЯМР и ЭПР и принцип их действия	Проводить основные операции и техническое обслуживание прибора	базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований
4	ПК-3	владением системой фундаментальных химических понятий	Принципы ядерного магнитного резонанса и электронного парамагнитного резонанса	Выбирать необходимые параметры и условия для получения наилучшего результата анализа.	Основными понятиями о природе и свойствах изучаемых материалов

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач. ед. (180 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)			
			5	6		
Контактная работа, в том числе:						
Аудиторные занятия (всего):		112	54	58		
Занятия лекционного типа		36	18	18	-	-
Лабораторные занятия		76	36	40	-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-	-	-	-
		-	-	-	-	-
Иная контактная работа:						
Контроль самостоятельной работы (КСР)		22	2	20		
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,4	0,2	0,2		
Самостоятельная работа, в том числе:						
Курсовая работа		14	-	14	-	-
Проработка учебного (теоретического) материала		16	8	8	-	-
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		8	4	4	-	-
Реферат		-	-	-	-	-
Подготовка к текущему контролю		7,6	3,8	3,8	-	-
Контроль:						
Подготовка к экзамену		-	-	-		
Общая трудоемкость	час.	180	72	108	-	-
	в том числе контактная работа	134,4	56,2	78,2		
	зач. ед	5	2	3		

2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 5 семестре (для студентов ОФО)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	Спектроскопия ЭПР	31,8	8		16	7,8
2.	Спектроскопия ЯМР	38	10		20	8
	Итого по дисциплине:		18	-	36	15,8

Разделы дисциплины, изучаемые в 6 семестре (для студентов ОФО)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	СРС
1	2	3	4	5	6	7
1.	ЯМ релаксация	28	6	-	10	12
2.	Исследование координационных соединений	34	6	-	16	12
3.	ЯМР твердого тела	25,8	6		14	5,8
	Итого по дисциплине:		18	-	40	29,8

2.3 Содержание разделов дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

1 семестр.

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Спектроскопия ЭПР	Основные понятия спектроскопии ЭПР. Параметры спектров ЭПР (g-фактор, константа СТВ, ширина линии). Особенности ЭПР растворов	<i>Коллоквиум</i>
2.	Спектроскопия ЯМР	Основные понятия спектроскопии ЯМР. Параметры спектров ЯМР. Устройство ЯМР спектрометра. Импульсный ЯМР и его особенности. Применение импульсных методов	<i>Реферат. Доклад на тему.</i>
3.	Методы определения структуры соединений	Специальные методики: методы двойного резонанса, ЯЭО и др. Многомерные эксперименты. Измерение времен релаксации.	<i>Решение задач</i>

2 семестр.

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1.	Исследование комплексных соединений.	Равновесия в растворах комплексных соединений. Устойчивость комплексных соединений Методы определения констант устойчивости спектроскопическими методами. Информация, получаемая из ЯМР и ЭПР спектров комплексных соединений. Исследование кинетики и механизма реакций комплексообразования.	<i>Коллоквиум</i>

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
2.	Анализ формы линии.	Классическое рассмотрение. Квантово-химическое рассмотрение. Анализ формы линии спектров ЯМР и ЭПР с использованием метода матрицы спиновой плотности.	<i>Проверка работ. Отчеты о выполнении.</i>
3.	ЯМР спектро-скопия твердого тела	Особенности экспериментальных техник. Вращение под магическим углом Получение структурной информации из спектров ЯМР твердого тела.	<i>Выполнение индивидуальных заданий</i>

2.3.2 Занятия семинарского типа

(учебным планом занятия семинарского типа не предусмотрены)

2.3.3 Лабораторные занятия

1 семестр.

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	Знакомство с ЭПР спектрометром. Съёмка спектров различных соединений. Анализ и интерпретация спектров.	<i>Устный опрос</i>
2.	Исследования комплексообразования меди с органическими лигандами. Приготовление растворов, съёмка спектров.	<i>Отчет по лаб. работе</i>
3.	Анализ спектров и обработка полученных результатов.	<i>Решение задач</i>
4.	Знакомство с ЯМР спектрометром. Съёмка спектров различных соединений. Анализ и интерпретация спектров.	<i>Отчет по лаб. работе</i>

2 семестр.

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	Исследование структуры соединений. Специальные методики.	<i>Отчет по лаб. работе</i>
2.	Исследования комплексообразования РЗЭ с органическими лигандами. Приготовление растворов, съёмка спектров	<i>Отчет по лаб. работе</i>
3.	Анализ спектров и обработка полученных результатов.	<i>Решение задач</i>
4.	Приготовление образцов твердого тела, съёмка спектров, расшифровка результатов	<i>Отчет по лаб. работе</i>

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

1. Синтез и изучение строения и свойств координационных соединений d- и f-элементов современными физическими методами исследования.

2. Использование методов квантовой химии для расчета свойств координационных соединений и материалов на их основе.
3. Синтез и физико-химическое изучение координационных соединений включения, в том числе потенциальных фарм. препаратов.
4. Синтез, строение и свойства координационных соединений и соединений включения по данным ЯМР спектроскопии.
5. Получение новых материалов с включением наночастиц d- и f-элементов, изучение их оптических и магнитных свойств.
6. Синтез, строение и спектральные свойства комплексных соединений лантаноидов с функционализированными органическими лигандами.
7. Получение и изучение свойств тонкопленочных материалов на основе комплексов лантаноидов.
8. Использование методов молекулярной спектроскопии при исследовании свойств композиционных материалов.
9. Влияние структуры и состава гибридных органо-неорганических твердофазных систем на их функциональные свойства.
10. Анодный синтез люминесцирующих координационных соединений РЗЭ в координирующих растворителях.
11. Электрохимический синтез координационных соединений лантаноидов - эффективных люминофоров.

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

№	Вид СРС	Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы
1	2	3
1	Теоретическая самоподготовка	Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. 89 с. Интернет ресурсы по дисциплине, в том числе указанные в п.6.
2	Подготовка к ЛР	
3	Реферат	
4	Доклады, презентации	

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,

– в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

Для формирования профессиональных компетенций в процессе освоения курса используется технология профессионально-развивающего обучения, предусматривающая не только передачу теоретического материала, но и стимулирование и развитие продуктивных познавательных действий студентов (на основе психолого-педагогической теории поэтапного формирования умственных действий).

Активизации и интенсификации познавательного процесса способствуют моделирование проблемных ситуаций, мультимедийные презентации в лекционном курсе. В рамках лабораторных занятий применяются методы проектного обучения, исследовательские методы, тренинговые формы, метод конкретных ситуаций. В процессе самостоятельной деятельности студенты осваивают и анализируют передовой опыт, используя имеющуюся литературу и информационные технологии, выступают с презентациями, накапливают портфолио разработок.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья предусмотрена организация консультаций с использованием электронной почты.

Семестр	Вид занятия (Л, ПР, ЛР)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Количество часов
5, 6	ЛР	Беседы, разбор ситуаций, работа в малых группах	20
	ЛР	презентация разработок в формате мини-конференции	30
Итого:			50

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и контрольных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в 5 семестре и зачета в 6 семестре.

4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

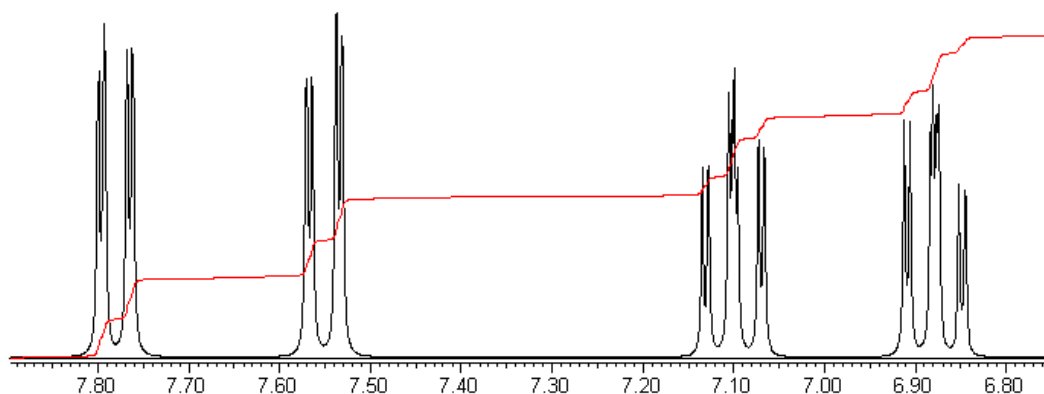
4.1.1 Примерные темы рефератов, докладов, эссе

4.1.2 Примеры вариантов контрольных работ, тестов

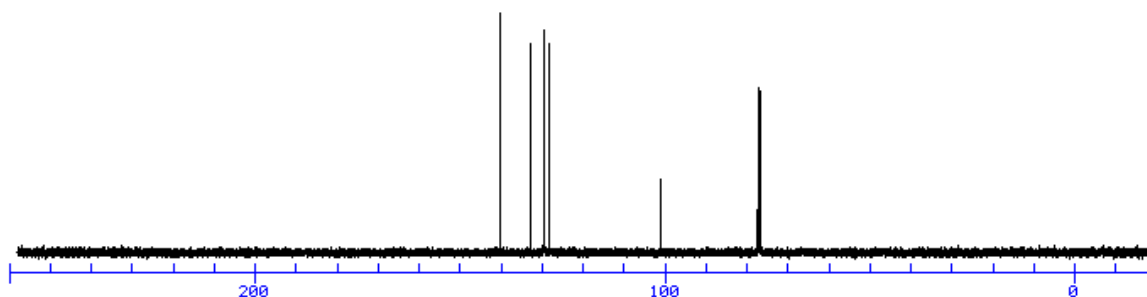
ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ
по теме «Исследование структуры соединений»

Вариант №4.

¹H ЯМР спектр - C₆H₄BrI



¹³C ЯМР спектр - C₆H₄BrI (140.2, 132.6, 129.6, 129.3, 128.3, 101.1, 77.3, 76.9, 76.6)



4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

4.2.1 Вопросы для подготовки к зачету

Вопросы для подготовки к зачету (1 семестр)

1. Явление ядерного магнитного резонанса. Классическое описание.
2. Устройство спектрометра ЯМР.
3. Основные параметры спектра ЯМР. Химический сдвиг.
4. Основные параметры спектра ЯМР. Константа спин-спиновой взаимодействия.
5. Процессы релаксации. Природа спин-решеточной и спин-спиновой ре-

лаксации.

6. Общий подход к анализу спектров ЯМР. Анализ спектров первого и более высоких порядков.
7. Специальные методы эксперимента в спектроскопии ЯМР. Методы двойного и множественного резонанса. Многомерная спектроскопия ЯМР, основные типы экспериментов.
8. Динамические эффекты в спектроскопии ЯМР. Понятие быстрого и медленного обмена. Точка коалесценции.
9. Изменения спектров ЯМР, вызываемые процессами комплексообразования. Анализ систем в приближении медленного обмена.
10. Анализ спектров в приближении быстрого обмена. Понятие предельного химического сдвига. Использование аддитивной модели для наблюдаемого химического сдвига для расчета параметров динамических систем.

Вопросы для подготовки к зачету (2 семестр)

1. Анализ формы линии спектра. Классический подход (метод ГМС).
2. Квантовомеханический подход к описанию спектров. Теория матрицы спиновой плотности.
3. Принцип метода ЭПР. Теория метода. Эффект Зеемана.
4. Устройство спектрометра ЭПР.
5. Основные параметры спектров ЭПР. g-фактор.
6. Основные параметры спектров ЭПР. Константа СТВ. Природа сверхтонкого взаимодействия.
7. Уширение линий спектра ЭПР. Механизмы процессов уширения.
8. Применение спектроскопии ЭПР для исследования координационных соединений. Исследования в твердом виде и в растворах.
9. Форма линии спектра ЭПР. Классическое описание спектров ЭПР (метод кривых Лоренца.). Ограничения метода.
10. Применение метода матрицы спиновой плотности к описанию динамических систем.

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

5.1 Основная литература

1. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Электронный ресурс]. Ч. 1 (вводный курс) / Ю.А. Устынюк. – М.: Техносфера, 2016. - 288 с. - ISBN 978-5-94836-410-0. – Режим доступа: https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=444862&sr=1

5.2 Дополнительная литература

1. Устынчук, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст] . Ч. 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынчук. - Москва : Техносфера, 2016. - 285 с. : ил. - (Мир химии). - Библиогр.: с. 285.
2. Пентин, Юрий Андреевич, Вилков, Лев Васильевич. Физические методы исследования в химии. - М. : Изд-во "МИР" Изд-во "АСТ", 2003. - 683с.
3. В.Т. Панюшкин, Ю.Е. Черныш, В.А. Волынкин, Г.С. Бородкин, И.Г. Бородкина. Ядерный магнитный резонанс в структурных исследованиях / Отв. ред. Р.З. Сагдеев. – М.: Красанд, 2017. – 350 с.

5.3 Периодические издания

Периодические журналы: " Журнал координационной химии "; "Журнал структурной химии".

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

1. <http://www.sciencedirect.com>
2. <http://www.spectroscopynow.com>
3. <http://www.msg.ameslab.gov/games/>

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

Методические рекомендации преподавателям по методике проведения основных видов учебных занятий

Лекции

Методика чтения лекций

Лекции являются одним из основных методов обучения по дисциплине, которые должны решать следующие задачи:

- изложить важнейший материал программы курса, освещающий основные моменты;
- развить у студентов потребность к самостоятельной работе над учебной и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее главных положений. Рекомендуются на первой лекции довести до внимания студентов структуру курса и его разделы, а в дальнейшем указывать начало каждого раздела, суть и его задачи, а, закончив изложение, подводить итог по этому разделу, чтобы связать его со следующим.

Содержание лекций

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Крайне желательно, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее в таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

Лабораторные занятия

Методика проведения лабораторных занятий

Целями проведения лабораторных работ являются:

- установление связей теории с практикой в форме экспериментального подтверждения положений теории;
- обучение студентов умению анализировать полученные результаты;
- контроль самостоятельной работы студентов по освоению курса;
- обучение навыкам профессиональной деятельности

Цели лабораторного практикума достигаются наилучшим образом в том случае, если выполнению эксперимента предшествует определенная подготовительная внеаудиторная работа. Поэтому преподаватель обязан довести до всех студентов график выполнения лабораторных работ с тем, чтобы они могли заниматься целенаправленной домашней подготовкой. Перед началом очередного занятия преподаватель должен удостовериться в готовности студентов к выполнению лабораторной работы путем короткого собеседования и проверки наличия у студентов заготовленных протоколов проведения работы.

Указания по самостоятельной работе.

Самостоятельная работа составляет не менее 50% от времени, отводимого на изучение дисциплины. При самостоятельной работе студент должен ознакомиться с основными учебниками и учебными пособиями, дополнительной литературой и иными доступными литературными источниками. При работе с литературой по конкретным темам курса, в том числе указанным для самостоятельной проработки, основное внимание следует уделять важнейшим понятиям, терминам, определениям, для скорейшего усвоения которых целесообразно вести краткий конспект.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

8.1 Перечень необходимого программного обеспечения

В курсе лабораторных работ используется следующее программное обеспечение: ACD Labs Chems sketch freeware, HyperChem 8.0, JEOL Delta.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

ЯМР спектрометры JEOL JMN-ECA-400, TESLA BS-587A, ЭПР спектрометры JEOL JES FA-300, Radiopan SE/X-2543.

№	Вид работ	Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащённость
1.	Лекционные занятия	Лекционная аудитория, оснащенная учебной мебелью, переносным проектором, ноутбуком, доской-экраном универсальным и соответствующим программным обеспечением (ауд. 435С).
2.	Лабораторные занятия	Лаборатории с установленным оборудованием: ЯМР спектрометр JEOL JMN-ECA-400, ЭПР спектрометр JEOL JES FA-300 (ауд. А020), ЯМР спектрометр TESLA BS-587A, ЭПР спектрометр Radiopan SE/X-2543 (ауд. 136)
3.	Групповые (индивидуальные) консультации	Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций, оснащенная учебной мебелью, интерактивной доской SMART Board, короткофокусным интерактивным проектором, ноутбуком, меловой доской и соответствующим программным обеспечением (422С)
4.	Текущий контроль, промежуточная аттестация	Учебная аудитория для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная учебной мебелью, интерактивной доской SMART Board, короткофокусным интерактивным проектором, ноутбуком, меловой доской и соответствующим программным обеспечением (422С)
5.	Самостоятельная работа	Помещение для самостоятельной работы студентов, оснащенное учебной мебелью, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспеченное доступом в электронную информационно-образовательную среду университета. (ауд. 428с, 431с)