МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Факультет химии и высоких технологий



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.03.01 ЯМР- И ЭПР- СПЕКТРОСКОПИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Направление подготовки – 04. 03.01 Химия

Направленность (профиль) – неорганическая химия и химия координационных соединений

Форма обучения – очная

Квалификация – бакалавр

Краснодар 2019

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.03.01 «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) №671 от 17 июля 2017 г. (Зарегистрирован в Минюсте 02 августа 2017 г. № 47644)

Программу составил

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

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.03.01 «ЯМР- и ЭПР- спектроскопия неорганических и координационных соединений» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, протокол № 13 «14» мая 2019 г.
Заведующий кафедрой
д.х.н., профессор Буков Н.Н. _____

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.03.01 «ЯМР- и ЭПР- спектроскопия неорганических и координационных соединений» обсуждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, протокол № 13 «14» мая 2019 г.

Заведующий кафедрой
д.х.н., профессор _____ Буков Н.Н.

Рабочая программа дисциплины Б1.В.ДВ.03.01 «ЯМР- и ЭПР- спектроскопия неорганических и координационных соединений» утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета химии и высоких технологий, протокол № 6 «16» мая 2019 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

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 дисциплинам по выбору Блока 1 «Дисциплины (модули)» (Б1.В.ДВ.03.01). Для его изучения используются знания курсов Б1.О.21 «Физические методы анализа» и Б1.О.17 «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 профессиональных компетенций: ПК-1, ПК-2.

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	**уметь**	**владеть**
2	ПК-1	Способен осуществлять стандартные операции по пред-	Основные методики подготовки образцов	Проводить подготовку образцов и вы-	Методикой подготовки образцов и выполне-

		лагаемым методикам, направленные на получение и исследование различных соединений и материалов	и проведения анализа.	полнять анализ для образцов различного типа.	ния анализа для образцов различного типа.
3	ПК-2	Способен применять современную аппаратуру при проведении научных исследований, а также обрабатывать и анализировать полученные результаты	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

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зач. ед. (108 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

Вид учебной работы		Всего часов	Семестры (часы)			
			8			
Контактная работа, в том числе:						
Аудиторные занятия (всего):		**60**	**60**			
Занятия лекционного типа		20	20		-	-
Лабораторные занятия		40	40		-	-
Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия)		-	-		-	-
		-	-		-	-
Иная контактная работа:						
Контроль самостоятельной работы (КСР)		4	4			
Промежуточная аттестация (ИКР)		0,2	0,2			
Самостоятельная работа, в том числе:						
Курсовая работа		-	-		-	-
Проработка учебного (теоретического) материала		20	20		-	-
Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций)		10	10		-	-
Реферат		-	-		-	-
Подготовка к текущему контролю		13,8	13,8		-	-
Контроль:						
Подготовка к экзамену		-	-			
Общая трудоемкость	**час.**	**108**	**108**		**-**	**-**
	в том числе контактная работа	**64,2**	**64,2**			
	зач. ед	**3**	**3**			

2.2 Структура дисциплины.

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы дисциплины, изучаемые в 8 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	22	4		8	10
2.	Спектроскопия ЯМР	40	8		16	16
3.	ЯМ релаксация	10	2		4	4
4.	Исследование координационных соединений	20	4		8	8
5.	ЯМР твердого тела	11,8	2		4	5,8
	ИТОГО по разделам дисциплины	103,8	20		40	43,8
	Контроль самостоятельной работы (КСР)	4	4			
	Промежуточная аттестация (ИКР)	0,2	0,2			
	Подготовка к текущему контролю	13,8	13,8			
	Общая трудоемкость по дисциплине	108	108			

2.3 Содержание разделов дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

№	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	*Коллоквиум*
2.	Спектроскопия ЯМР	Основные понятия спектроскопии ЯМР. Параметры спектров ЯМР. Устройство ЯМР спектрометра. Импульсный ЯМР и его особенности. Применение импульсных методов	*Реферат. Доклад на тему.*
3.	Методы определения структуры соединений	Специальные методики: методы двойного резонанса, ЯЭО и др. Многомерные эксперименты. Измерение времен релаксации.	*Решение задач*
4.	Исследование комплексных соединений.	Равновесия в растворах комплексных соединений. Устойчивость комплексных соединений Методы определения констант устойчивости спектроскопическими методами. Информация, получаемая из	*Коллоквиум*

№	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
		ЯМР и ЭПР спектров комплексных соединений. Исследование кинетики и механизма реакций комплексообразования.	
5.	Анализ формы линии.	Классическое рассмотрение. Квантово-химическое рассмотрение. Анализ формы линии спектров ЯМР и ЭПР с использованием метода матрицы спиновой плотности.	*Проверка работ. Отчеты о выполнении.*
6.	ЯМР спектроскопия твердого тела	Особенности экспериментальных техник. Вращение под магическим углом Получение структурной информации из спектров ЯМР твердого тела.	*Выполнение индивидуальных заданий*

2.3.2 Занятия семинарского типа

(учебным планом занятия семинарского типа не предусмотрены)

2.3.3 Лабораторные занятия

№	Наименование лабораторных работ	Форма текущего контроля
1	3	4
1.	Знакомство с ЭПР спектрометром. Съемка спектров различных соединений. Анализ и интерпретация спектров.	*Устный опрос*
2.	Исследования комплексообразования меди с органическими лигандами. Приготовление растворов, съемка спектров.	*Отчет по лаб. работе*
3.	Анализ спектров и обработка полученных результатов.	*Решение задач*
4.	Знакомство с ЯМР спектрометром. Съемка спектров различных соединений. Анализ и интерпретация спектров.	*Отчет по лаб. работе*
5.	Исследование структуры соединений. Специальные методики.	*Отчет по лаб. работе*
6.	Исследования комплексообразования РЗЭ с органическими лигандами. Приготовление растворов, съемка спектров	*Отчет по лаб. работе*
7.	Анализ спектров и обработка полученных результатов.	*Решение задач*
8.	Приготовление образцов твердого тела, съемка спектров, расшифровка результатов	*Отчет по лаб. работе*

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ

Курсовые работы – не предусмотрены

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, ме-

тод 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.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

4.1 Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

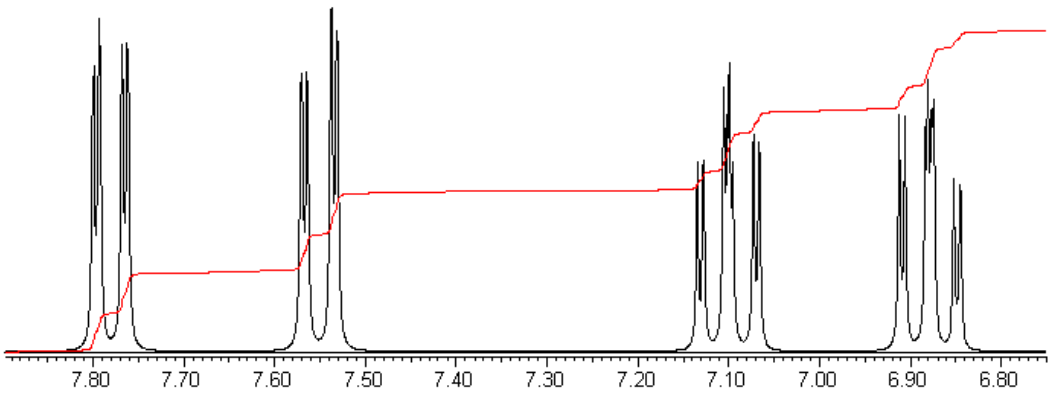
Текущий контроль осуществляется в устной и электронной форме в процессе выполнения лабораторных работ. Промежуточный контроль проводится в виде тестов и контрольных работ. Итоговый контроль осуществляется приемом зачета в 8 семестре.

4.1.1 Примерные темы рефератов, докладов, эссе

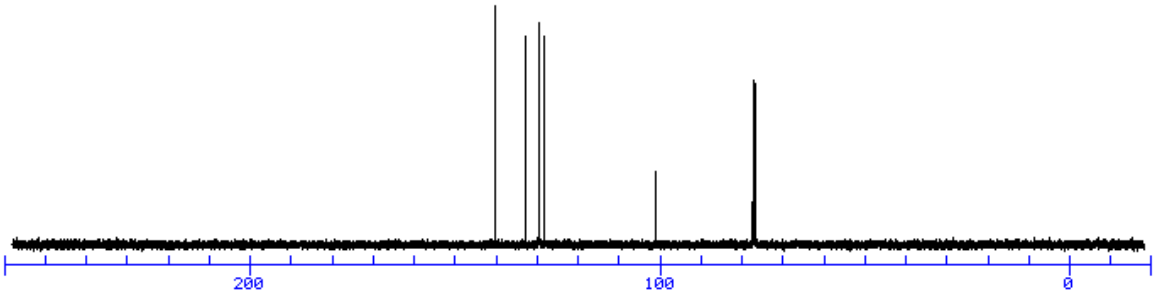
4.1.2 Примеры вариантов контрольных работ, тестов

ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ
по теме «Исследование структуры соединений»

Вариант №4.
^{1}H ЯМР спектр - C_6H_4BrI



^{13}C ЯМР спектр - C_6H_4BrI (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

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-спинового взаимодействия.
5. Процессы релаксации. Природа спин-решеточной и спин-спиновой релаксации.
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.
11. Анализ формы линии спектра. Классический подход (метод ГМС).
12. Квантовомеханический подход к описанию спектров. Теория матрицы спиновой плотности.
13. Принцип метода ЭПР. Теория метода. Эффект Зеемана.
14. Устройство спектрометра ЭПР.
15. Основные параметры спектров ЭПР. g-фактор.
16. Основные параметры спектров ЭПР. Константа СТВ. Природа сверх-

тонкого взаимодействия.

17. Уширение линий спектра ЭПР. Механизмы процессов уширения.
18. Применение спектроскопии ЭПР для исследования координационных соединений. Исследования в твердом виде и в растворах.
19. Форма линии спектра ЭПР. Классическое описание спектров ЭПР (метод кривых Лоренца.). Ограничения метода.
20. Применение метода матрицы спиновой плотности к описанию динамических систем.

Критерии оценки по промежуточной аттестации

Оценки «зачет» заслуживает студент, обнаруживший сформированность компетенций, предусмотренных программой дисциплины, необходимых для дальнейшей учёбы и предстоящей работы по профессии, справляющийся с выполнением заданий, предусмотренных программой.

Оценка «незачет» выставляется студенту, обнаружившему значительные пробелы в знаниях основного программного материала, допустившему принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий. Как правило, оценка «незачет» ставится студентам, которые не освоили в должной мере функции преподавателя химии и не смогут приступить к профессиональной деятельности по окончании вуза без дополнительных занятий по соответствующим дисциплинам.

Критерии оценки сформированных компетенций определяются уровнем усвоения изучаемого материала и отражены в ФОС дисциплины.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации 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.

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. Устынюк, Ю.А. Лекции по спектроскопии ядерного магнитного резонанса [Текст] . Ч. 1 (вводный курс) / Ю. А. Устынюк. - 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".
1. http://www.sciencedirect.com
2. http://www.spectroscopynow.com
3. http://www.msg.ameslab.gov/gamess/

6. 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. Рекомендуется 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 мене 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.

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

7.2 Перечень необходимого программного обеспечения

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

7.3 Перечень информационных справочных систем:

1. Электронная библиотечная система eLIBRARY.RU (http://www.elibrary.ru)/

8. 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 оснащенность
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,	Учебная аудитория для проведения текущего контроля и

	промежуточная аттестация	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)