

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Оренбургский государственный университет»

*Факультет повышения квалификации преподавателей*

**УТВЕРЖДАЮ:**

Проректор по учебно-методической работе

\_\_\_\_\_ Т.П. Петухова

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Дополнительная профессиональная программа**

**повышения квалификации**

**«Физико-химические методы исследования строения молекул»**

Оренбург 2014

## Содержание

1 Общие положения.....	3
1.1 Цель программы.....	3
1.2 Планируемые результаты освоения программы.....	3
1.3 Трудоемкость и срок освоения программы.....	3
1.4 Категория слушателей и требования к уровню их подготовки.....	3
1.5 Форма обучения.....	4
1.6. Промежуточная и итоговая аттестация.....	4
1.7 Учебно-методическое и информационное обеспечение ДПП.....	4
2 Документы, регламентирующие содержание и организацию образовательного процесса при реализации программы.....	6
2.1 Учебный план программы	6
2.2 Фонд оценочных средств .....	9

# **1 Общие положения**

## **1.1 Цель программы**

Программа «Физико-химические методы исследования строения молекул» предназначена для развития профессиональных компетенций преподавателя в области теоретических основ ядерного магнитного резонанса и электронного парамагнитного резонанса и практического применения изученных методов, так как они необходимы для учебной и научно-исследовательской работы.

## **1.2 Планируемые результаты освоения программы**

В результате изучения дисциплины слушатель

Должен знать:

- физические принципы методов;
- применение и технику эксперимента спектроскопии ЯМР;
- приложение, технику и экспериментальные методики спектроскопии ЭПР.

Должен уметь:

- анализировать общий вид спектров;
- определять основные количественные характеристики спектров;
- применять полученные теоретические знания в практике химического эксперимента.

Владеть навыками:

- регистрации спектров ЭПР;
- расшифровки спектров ЯМР и ЭПР;
- идентификации соединений с помощью спектров.

В данном разделе рекомендуется указать цели и задачи освоения дисциплины (модуля) и результаты обучения дисциплины (модуля) применительно к знаниям, умениям, навыкам, опыту практической деятельности, приобретаемым в процессе изучения дисциплины (модуля).

## **1.3 Трудоемкость и срок освоения программы**

Объем программы повышения квалификации – 36 часов:

- лекции – часов;
- практические занятия – часа;
- самостоятельная работа – 24 часа.

## **1.4 Категория слушателей и требования к уровню их подготовки**

Программа рассчитана на преподавателей высших профессиональных образовательных организаций высшего образования, имеющих высшее

профессиональное образование и осуществляющих профессиональную деятельность по подготовке бакалавров и специалистов по направлению подготовки 020201 Фундаментальная и прикладная химия, 020100 Химия.

### **1.5 Форма обучения**

Форма обучения очная

### **1.6 Итоговая аттестация**

Итоговая аттестация проводится в форме зачета, включающего теоретические вопросы и практические задания по расшифровке спектров.

По результатам зачета слушатель получает оценку «зачтено» или «незачтено».

Дополнительная программа повышения квалификации считается полностью освоенной при условии получения оценок «зачтено». Слушатели, полностью освоившие программу, получают удостоверение о повышении квалификации.

### **1.7 Учебно-методическое и информационное обеспечение ДПП**

Для реализации программы необходимо оборудование для регистрации спектров.

### **Список рекомендуемой литературы**

#### **Основная литература**

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. – М.: Мир, ООО «Издательство АСТ», 2003. – 683 с.

2. Кириллова Е.А. Методы спектрального анализа: учебное пособие / Е.А. Кириллова, В.С. Маряхина; Оренбургский гос.ун-т. – Оренбург : ОГУ, 2013. – 105 с.

3. Органическая химия : практикум: учебное пособие для студентов, обучающихся по программам высшего профессионального образования по специальности 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и направлению подготовки 020100.62 Химия / Е. А. Строганова [и др.] ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. проф. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург: Университет, 2013.

Ч. 3 : Применение методов УФ, ИК и ПМР спектроскопии в структурном анализе органических соединений. - , 2013. - 116 с. : ил. - Библиогр.: с. 65-66. - Прил.: с. 67-115. - ISBN 978-5-4418-0035-8.

#### **Дополнительная литература**

1. Федотов М. А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии (растворы и жидкости) / М. А. Федотов. - М. : Физматлит, 2009. - 384 с. : ил. - Библиогр. в конце гл. - ISBN 978-5-9221-1202-4.

### **Периодические издания**

1. Оптика и спектроскопия: журнал. 70670. - М. : Академиздатцентр "Наука" РАН. - 1999.

### **Ресурсы сети Интернет**

1. [http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)

## 2 Документы, регламентирующие содержание и организацию образовательного процесса при реализации программы

### 2.1 Учебный план программы

Таблица 1

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела	Форма текущего контроля
1	2	3	4
1	Спектроскопия ЯМР	<p>Магнитные моменты ядер и электронов. Спин-орбитальное взаимодействие. Поведение магнитоактивных частиц во внешнем магнитном поле. Фактор Ланде. Эффект Зеемана. Парамагнетики и диамагнетики. Обменное взаимодействие. Магнитное упорядочение. Ферромагнетики и антиферромагнетики. Закон Кюри-Вейса.</p> <p>Магнитные свойства ядер атомов. Сверхтонкое взаимодействие. Влияние спина ядра на эффект Зеемана. Элементарное условие магнитного резонанса. Поглощение энергии и спин-решеточная релаксация. Система спинов в постоянном и переменном магнитных полях. Теорема Лармора. Спин-спиновая релаксация. Уравнения Блоха. Комплексная магнитная восприимчивость. Форма линий поглощения и дисперсии.</p> <p>Реализация условий ядерного магнитного резонанса. Принципиальная блок-схема ЯМР-спектрометра стационарного типа и импульсного Фурье-спектрометра ЯМР. Техника и методика эксперимента. Общий вид спектра ЯМР и его обзорный анализ. Число сигналов, их форма, положение в спектре, интенсивность. Химический</p>	К

		<p>сдвиг, спин-спиновое расщепление, времена продольной и поперечной релаксации. Динамическая поляризация ядер. Эффект Оверхаузера. Двойной электронно-ядерный резонанс (ДЭЯР). Применение в химии спектроскопии ЯМР Н1. Структурный анализ индивидуальных соединений, донорно-акцепторных и Н-комплексов, хиральных молекул. Количественный анализ смеси. Изучение быстро протекающих процессов (химический обмен ядер, внутреннее вращение). Обнаружение и характеристика структуры интермедиатов в химических реакциях (карбокатионы, ионные пары и т.п.). Определение термодинамических характеристик химических реакций. Применение в структурно-аналитических целях спектроскопии магнитного резонанса на ядрах <math>^{13}\text{C}</math>, <math>^{31}\text{P}</math>, <math>^{19}\text{F}</math>, <math>^{77}\text{Se}</math> и др.</p>	
2	Спектроскопия ЭПР	<p>Реализация условий электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Техника и экспериментальные методики спектроскопии ЭПР. Форма сигнала. Положение резонансного сигнала и g-фактор в изотропных и анизотропных системах. Влияние кристаллических полей, тонкая и сверхтонкая структуры спектров. Спин-спиновое и спин-решеточное взаимодействие. Влияние обменного взаимодействия на форму линии. Применение спектроскопии ЭПР в химии: структурные и кинетические исследования. Изучение электронной и пространственной структуры координационных соединений, радикалов и ион-радикалов; характеристика парамагнитных центров в твердых системах и т.п. Изучение механизмов химических</p>	К

		реакций. Химическая поляризация электронов. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Использование спиновых меток	
3	Решение задач	Решение задач по расшифровке структуры на основании данных метода ЯМР- и ЭПР-спектроскопии. Разбор методики применения программы SimFonia для расшифровки экспериментальных спектров и построения на основе экспериментально полученных данных теоретического спектра.	РГЗ

## 2.2 Распределение видов учебной работы по разделам дисциплины (модуля)

Таблица 2

№ раздела	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			СР
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Спектроскопия ЯМР	10	4			6
1.1	Физические основы метода		2			2
1.2	Техника и методика эксперимента		1			2
1.3	Применение метода		1	2		2
2	Спектроскопия ЭПР	10	4			6
2.1	Физические основы метода		2			2
2.2	Техника и экспериментальные методики спектроскопии ЭПР		2		4	4
3	Решение задач	8		2		6
	<b>Зачет</b>	2				
	<b>Итого</b>	36	10	4	4	18



## 2.3 Фонд оценочных средств

### Контрольные вопросы и задания

1. Как выражается энергия взаимодействия ядра, обладающего ненулевым спином, с внешним магнитным полем?
2. Что такое спин-решеточная и спин-спиновая релаксация? Как соотносятся их времена в разных агрегатных состояниях вещества?
3. Запишите, исходя из условия ЯМР для двухуровневой системы, выражение частоты через индукцию поля.
4. Перечислите и запишите выражения и шкалы химических сдвигов в ЯМР.
5. Что влияет на величину химических сдвигов в ПМР? Почему химические сдвиги в ЯМР  $^{19}\text{F}$  и  $^{13}\text{C}$  меняются в значительно большем диапазоне, чем в ПМР?
6. Как связаны обычные и приведенные константы спин-спинового взаимодействия? В чем преимущества приведенных констант?
7. Как соотносятся интегральные интенсивности сигналов ЯМР для групп ядер одного и того же изотопа и интенсивности компонентов мультиплетов?
8. Укажите основные параметры и характерные черты спектров ЯМР первого порядка. В чем различие спектров первого и не первого порядков?
9. С какими физико-химическими характеристиками установлены корреляции химических сдвигов в ЯМР?
10. В спектре  $^{13}\text{P}$  для соединения  $\text{P}_4\text{S}_3$  наблюдается дублет (1:1) и квартет (1:3:3:1) с соотношением интегральных интенсивностей дублет : квартет = 3 : 1. Какова структура соединения?
11. Что такое сдвигающие реагенты в ЯМР и что дает их применение в структурных исследованиях?
12. В чем заключается эффект «примесных спинов» и как его можно использовать для определения некоторых ядер?
13. Каковы критерии медленного, быстрого и промежуточного обмена ядер в спектрах ЯМР?
14. При отсутствии обмена протонами между А-Н и В-Н линии ПМР отстоят для них на 250- Гц. При комнатной температуре происходит обмен, и линии отстоят на 25 Гц. Концентрации частит одинаковы (0,2 моль/л), а время спин-решеточной релаксации велико. Рассчитайте время жизни протона у А-Н и найдите константу скорости обмена.
15. Объясните условие ЭПР и его реализацию в экспериментальном воплощении метода.
16. Что такое g-фактор Ланде и как он влияет на положение сигнала ЭПР?

17. Каковы правила отбора для переходов между зеемановскими уровнями по электронному и ядерному спиновым квантовым числам в системах с электрон-ядерным сверхтонким взаимодействием?
18. Константа СТВ с  $^{13}\text{C}$  в метиловом радикале  $a(^{13}\text{C}) = 41 \cdot 10^{-4}$  Т, а константа протонного СТВа( $^1\text{H}$ )  $= 23 \cdot 10^{-4}$  Т. Попробуйте схематично изобразить спектр ЭПР радикала  $^{13}\text{CH}_3$ .
19. Как возникает тонкая структура спектров ЭПР анизотропных систем? Что такое крамеровское расщепление?
20. В чем суть метода «спиновых меток»? Какие данные он позволяет получать?
21. Какие методы множественного резонанса применяют в спектроскопии ЭПР?
22. В каких случаях возникает неравновесная заселенность зеемановских спиновых состояний?

#### **РАЗРАБОТЧИКИ ПРОГРАММЫ:**

Заведующий кафедрой биофизики и физики  
конденсированного состояния

В.Л.Бердинский

Старший преподаватель кафедры химии

Т.А. Ткачева

#### **СОГЛАСОВАНО:**

Декан ФПКП

С.В.Гуленина

Заведующий кафедрой биофизики и физики  
конденсированного состояния

В.Л.Бердинский