



**Федеральное агентство научных организаций (ФАНО)
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук
(ИОХ РАН)**



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИОХ РАН
Академик

М.П.Егоров

«*шоя*» 2017 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Спектроскопия ядерного магнитного резонанса в органической химии»**

Б1.В.ДВ.2 «Вариативная часть»;
раздел «Обязательные дисциплины»
основной профессиональной образовательной программы высшего образования
программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по
направлению
подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль)
02.00.03 - Органическая химия
02.00.10 - Биоорганическая химия

Форма обучения очная

Москва
2017

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 № 869.

Разработчики:

к.х.н., с.н.с. **Ф.В.Тоукач** (Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН).

Программа принята на заседании Ученого совета ИОХ РАН

Протокол № от «13» июля 2017 г.

Ученый секретарь:

Кандидат химических наук  И.К. Коршевец

1. Цели и задачи освоения дисциплины.

Цель изучения дисциплины:

Формирование компетенций в области физико-химических методов установления состава и строения органических соединений

Задачи изучения дисциплины:

- Сформировать представления об спектральных методах химического анализа.
- Ознакомить обучающихся с фундаментальными физическими основами важнейших современных физико-химических методов анализа.
- Сформировать у обучающихся навыки и умения анализа и расшифровки спектров ЯМР различных органических соединений, установления строения соединений по совокупности их спектров.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Спектроскопия ядерного магнитного резонанса в органической химии» относится к циклу Б1.В.ДВ.2 «Вариативная часть»; раздел «Дисциплины по выбору» основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки.

Знания и компетенции, полученные аспирантами в ходе освоения дисциплины, могут быть использованы при проведении научных исследований и написании кандидатских диссертационных исследований, а также для сдачи профильного кандидатского экзамена при обучении в аспирантуре по профилям 02.00.03 «Органическая химия», 02.00.10 - Биоорганическая химия.

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины:

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1)

Общепрофессиональные компетенции:

способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в физической химии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

Профессиональные компетенции:

- способность приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-2);

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

знать:

- основы инструментальных методов физико-химического анализа;
- теоретические основы взаимодействия электромагнитного излучения с веществом;
- физические основы метода ЯМР- спектроскопии.

уметь:

- излагать фундаментальные основы принципов регистрации электромагнитного излучения;
- интерпретировать данные спектров ЯМР органических и неорганических соединений;
- расшифровывать молекулярную структуру неизвестных соединений на основе совокупности спектроскопических данных.

владеть:

- представлениями об инструментальных методах физико-химического анализа неорганических и органических веществ;
- навыками интерпретации ЯМР- спектров органических, элементоорганических и неорганических соединений;
- навыками расшифровки молекулярных структур неизвестных соединений на основе данных совокупности различных спектроскопических методов

4. Структура и содержание дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц (108 часов).

Дисциплина изучается на 2-м году обучения. Дисциплина состоит из 7 разделов.

4.1. Структура дисциплины.

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)							Вид итогового контроля
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных			КСР.	Сам. работа	
				Лекц.	Лаб.	Прак.			
1	Спектроскопия ядерного магнитного резонанса	108	64	32	-	32	18	26	зачет

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	
1	Введение. Химический сдвиг. Спиновое расщепление	4	-	4	4	4
2	Проявление спинового расщепления в спектрах	6	-	6	4	2
3	Зависимость спектров от структуры	6	-	6	2	4
4	Импульсный ЯМР. Вектор макроскопической намагниченности	4	-	4	2	4
5	Двумерная спектроскопия	4	-	4	2	4
6	Ядерный эффект Оверхаузера	4	-	4	2	4
7	Практические аспекты ЯМР	4	-	4	2	4

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

Содержание лекционного курса:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Введение. Химический сдвиг. Спиновое расщепление	<p>Введение. Информационные ресурсы по теме ЯМР. Что и зачем изучается в рамках программы. 1.2 Применение ЯМР в органической химии, преимущества и недостатки метода. Основные характеристики одномерного спектра ЯМР. Количество, положение, форма и площадь сигналов. Простейшие примеры спектров. Причины возникновения явления ЯМР. Ядра в магнитном поле и их экранирование ядрами электронами и химическим окружением. Химический сдвиг, единицы измерения. Некоторые магнитно-активные ядра. Абсолютная и относительная чувствительность. Стандарты химических сдвигов. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C. Зависимость от соседствующих атомов и связей, характерные значения.</p> <p>Причины спин-спинового взаимодействия. Спиновое расщепление на нескольких одинаковых соседях. Треугольник Паскаля. Инвариантность дублета дублетов относительно последовательности рассмотрения расщепления. Другие примеры спинового расщепления. Случаи с тремя соседями. Вырождение дублета дублетов в триплет. Спиновое расщепление на ядрах со спином 1. Изотопный сдвиг. Спектр реального DMSO-d₆.</p>	Лекции
2	Проявление спинового расщепления в спектрах	<p>Основные протон-протонные КССВ. Спектры, снятые на спектрометрах с разной рабочей частотой. Спектры 1,2,4-дибромбензола и β-D-галактопиранозы. Примеры спинового расщепления: сигналы протонов замещенного бензола (простые случаи). Минорные линии в спектрах молекул с несколькими химически-эквивалентными ядрами.</p> <p>Примеры спинового расщепления: сигналы протонов замещенного бензола (сложные случаи). Спектры молекул с плоскостью симметрии. Примеры спинового расщепления: изменения в спектрах при несовпадении КССВ между протонами в замещенном бензоле. Примеры спинового расщепления: теоретический спектр ^1H аллилбромида.</p>	Лекции
3	Зависимость спек-	Гетероядерное спин-спиновое взаимодействие. Сателлиты ^{13}C . Понятие широкополосной развязки. Резуль-	Лекции

	тров от структуры	<p>тат, преимущества и недостатки эксперимента ЯМР ^{13}C Gated. Зависимость КССВ от гиромагнитного отношения. Основные протон-углеродные КССВ. Зависимость от гибридизации. Знак КССВ. Эффект "крыши". Вырождение двух дублетов в синглет. Различные варианты проявления эффекта крыши в системе АВС. Примеры спектров. Алифатические и ароматические протоны. Перекрывание сигналов. Неидеальность формы линии, площади и эффекта крыши.</p> <p>Спектры ЯМР смесей. Выявление подспектров компонентов смеси. Определение количественного состава смеси. Зависимость КССВ от структуры. Влияние валентного угла, π-электронов и заместителей на геминальные КССВ. Влияние торсионного угла и длин связей на вицинальные КССВ. Кривая Карплуса. Эффекты не первого порядка. Теоретические и расчетные спектры сильносвязанных систем. Обменные явления в ЯМР. Зависимость спектров ЯМР от температуры. Типичные барьеры распространенных обменных и конформационных процессов. Характеристическое время ЯМР. Сигналы подвижных протонов.</p>	
4	Импульсный ЯМР. Вектор макроскопической намагниченности	<p>Классический и импульсный ЯМР. Ограничения метода с непрерывной разверткой. Короткие и длинные импульсы. «Настройка колоколов». Преобразование Фурье. Схема простейшего эксперимента ЯМР. Накопление FID'a. Основные параметры одномерного эксперимента ЯМР. Естественное и цифровое разрешение. FID и спектр ЯМР. Экспоненциальный спад FID'a. Лоренцева форма линии. Данные в частотном и временном представлении. Действительная и мнимая части Фурье-образа.</p> <p>Магнитный момент ядра и вектор макроскопической намагниченности. Вращающаяся система координат. Влияние импульса на вектор макроскопической намагниченности. Виды импульсов. Воздействие импульса на образец. Непопадание линии в резонанс. Детектирование нескольких линий одновременно. Широкополосная развязка в спектрах ЯМР ^{13}C.</p>	Лекции
5	Двумерная спектроскопия	<p>Двумерная корреляционная спектроскопия. Эксперимент COSY и его импульсная диаграмма. Двумерное преобразование Фурье. Примеры гомо- и гетероядерных спектров COSY. Информация, получаемая из этих экспериментов в структурных исследованиях. Отнесение протонного спектра по данным COSY. Селективное подавление спинового взаимодействия. Одномер-</p>	Лекции

		ные спектры двойного резонанса. Пример структурного исследования с помощью серии экспериментов двойного резонанса.	
6	Ядерный эффект Оверхаузера	Ядерный эффект Оверхаузера. Зависимость знака и величины NOE от структуры. Применение спектроскопия ядерного эффекта Оверхаузера для выявления пространственных контактов протонов. Разностные эксперименты. Установление положения заместителей и отнесение протонного спектра с помощью разностной спектроскопии NOE.	Лекции
7	Практические аспекты ЯМР	Операции с FID'ом до преобразования Фурье. Экспоненциальное и Гауссово умножение. Дополнение нулями, обрезание, аподизация. Аналоговый и цифровой сигналы. Оцифровка сигнала ЯМР. Усиление в канале приема. Принципиальная схема спектрометра ЯМР. Критерий Найквиста. Стабилизация условий резонанса в пространстве и во времени. Шиммирующие катушки. Дейтериевая стабилизация (LOCK). Критерии оценки разрешения. Приготовление образца и выбор растворителя. Типичные ошибки. Распространенные в ЯМР растворители и их свойства. Распространенные программы для работы со спектрами ЯМР. Предсказание протонных спектров с помощью ACDLabs HNMR. Основные эксперименты ЯМР и получаемая из них информация. Схема структурного исследования с помощью спектроскопии ЯМР.	Лекции

Содержание семинаров и практического курса:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Введение. Химический сдвиг. Спиновое расщепление	Предсказание формы сигналов в одномерных протонных спектрах. Рациональное решение задачи по соотношению спектров со структурой. Ход рассуждений и возможные выводы	Семинары, практические работы
2	Проявление спинового расщепления в спектрах	Основные протон-протонные КССВ. Примеры спинового расщепления: сигналы протонов замещенного бензола (простые и сложные случаи). Спектры молекул с плоскостью симметрии. Примеры спинового расщепления: изменения в спектрах при несовпаде-	Семинары, практические работы

		нии КССВ между протонами в замещенном бензоле.	
3	Зависимость спектров от структуры	Тренировка в экспертной оценке соответствия структуре заявленной по одномерному протонному спектру. Отнесение одномерных протонных спектров на основании формы линии и измерения КССВ..	Семинары, практические работы
4	Импульсный ЯМР. Вектор макроскопической намагниченности	Преобразование Фурье. Накопление FID'а. Основные параметры одномерного эксперимента ЯМР. FID и спектр ЯМР. Экспоненциальный спад FID'а. Лоренцева форма линии. Данные в частотном и временном представлении. Действительная и мнимая части Фурье-образа. Широкополосная развязка в спектрах ЯМР ¹³ C.	Семинары, практические работы
5	Двумерная спектроскопия	Двумерная корреляционная спектроскопия.. Одномерные спектры двойного резонанса. Пример структурного исследования с помощью серии экспериментов двойного резонанса.	Семинары, практические работы
6	Ядерный эффект Оверхаузера	Ядерный эффект Оверхаузера.. Установление положения заместителей и отнесение протонного спектра с помощью разностной спектроскопии NOE.	Семинары, практические работы
7	Практические аспекты ЯМР	Экспоненциальное и Гауссово умножение. Принципиальная схема спектрометра ЯМР. Критерий Найквиста. Стабилизация условий резонанса в пространстве и во времени. Приготовление образца и выбор растворителя. Типичные ошибки. Тренировка в установлении неизвестных особенностей первичной структуры и конформации по набору разнородных спектров. Отнесение одномерных спектров на основании анализа двумерных гомо- и гетероядерных корреляций...	Семинары, практические работы

5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальным материалов в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а также результатов компьютерного моделирования физикохимических процессов.
3. Проведение практических работ в научной лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

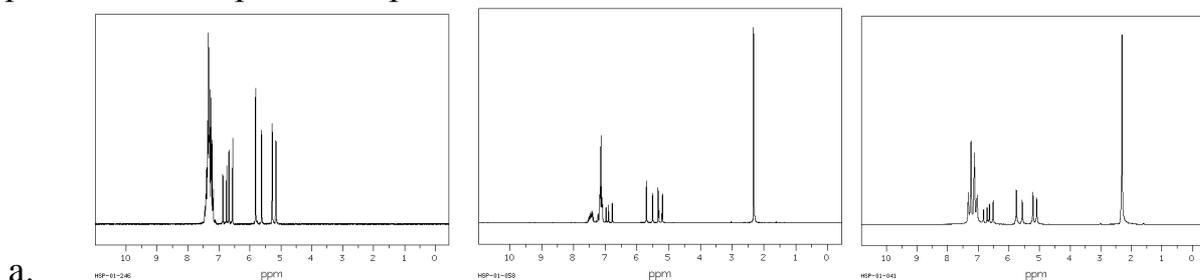
Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

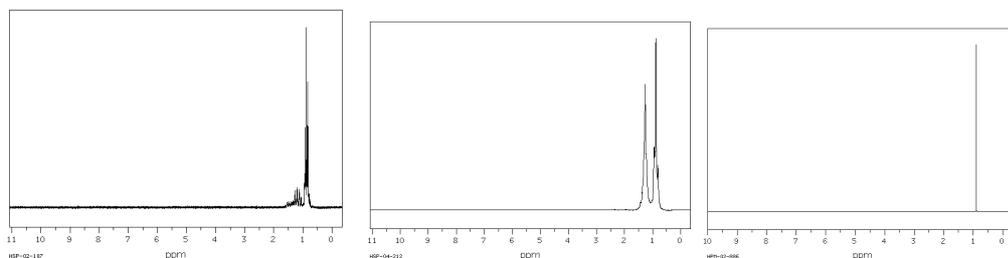
Форма контроля знаний – контрольные работы и зачет в конце курса, включающий теоретические вопросы и задачу.

Примеры вопросов контрольных работ:

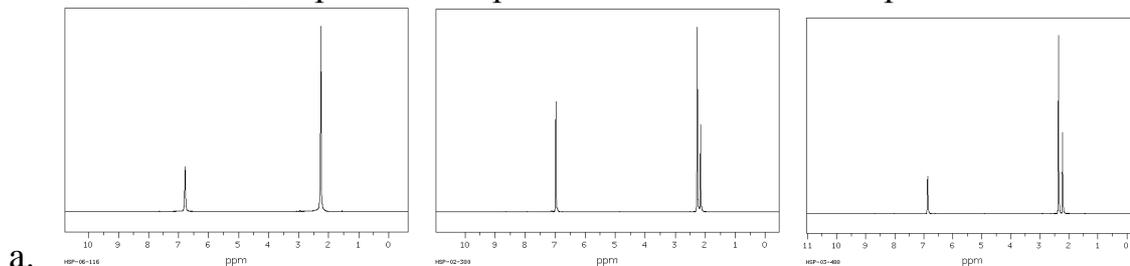
- 1) Укажите среди приведенных ниже спектров спектр *пара*-метилстирола, *орто*-метилстирола, стирола



- 2) Укажите среди приведенных ниже спектров спектр пентана, неопентана, изопентана



- 3) Укажите среди приведенных ниже спектров спектр 1,2,3-триметилбензола, 2-бром-1,3,5-триметилбензола, 1,3,5-триметилбензола



- 4) Как изменится абсолютное значение геминальной КССВ с увеличением валентного угла центрального атома от 105° до 117° ?
- 5) Как изменяется величина вицинальной КССВ с увеличением торсионного угла между крайними связями от 0° до 180° ?

- 6) Как влияют электроотрицательные заместители на величины геминальных и вицинальных КССВ?
- 7) Как влияет длина средней связи на величину вицинальной КССВ?
- 8) Каковы преимущества импульсного ЯМР перед ЯМР с непрерывной разверткой?
- 9) Какая функция приближенно описывает спадание огибающей FID?
- 10) Как называются осцилляции проекции ВМН на горизонтальную плоскость?
- 11) Расфокусировка каких компонент ВМН устраняется спиновым эхом?
- 12) Почему спиновое эхо не рефокусирует гетероядерные мультиплеты?
- 13) Какой части комплексного Фурье-образа соответствует сигнал поглощения?
- 14) Функцией какого типа описывается сигнал в резонансной катушке, вызванный вращающимся магнитным моментом?

Список вопросов для подготовки к экзамену:

Корреляция "структура – одномерный спектр"

1. Какая характеристика сигналов в спектре ЯМР соответствует количеству атомов, давших сигнал?
2. Какая характеристика сигналов в спектре ЯМР в наибольшей степени коррелирует с распределением электронной плотности по молекуле?
3. В чем чаще всего измеряются химические сдвиги?
4. В чем чаще всего измеряются константы спин-спинового взаимодействия?
5. Какие атомы называются "магнитно-эквивалентными"?
6. Каковы границы применимости треугольника Паскаля?
7. Какой сигнал должен дать протон с двумя одинаковыми соседями-протонами близко и одним далеко?
8. Какой сигнал должен дать протон с тремя одинаковыми соседями-протонами далеко и одним близко?
9. Как будет выглядеть сигнал протона в соединении $\text{H}_2\text{N}-\text{CO}-\text{CHD}_2$?
10. Как будет выглядеть сигнал выделенного протона в соединении $\text{Br}_2\text{HC}-\text{CHD}-\text{COOH}$?
11. Что такое изотопный сдвиг?
12. Какова должна быть форма сигналов протонов в 3-бромтолуоле, в предположении, что все мета-КССВ равны друг другу, и все орто-КССВ равны друг другу?
13. В каких случаях "крыша" сигналов системы из нескольких протонов получается более крутой?
14. Какие структурные особенности молекул приводят к спектрам не первого порядка?

1. Относительно чего измеряются химические сдвиги?
2. Как влияет гибридизация атома углерода на его химический сдвиг?
3. Как влияет электроотрицательность соседних атомов на химический сдвиг?
4. Каковы типичные значения химических сдвигов в ароматике?
5. Каковы характерные значения КССВ через разное число связей в бензольном кольце?
6. Каковы характерные значения геминальной КССВ в замещенном этилене?
7. Каковы характерные значения КССВ через три связи в алифатике?
8. Почему КССВ через 4 связи в алифатике наблюдаются редко, а в ароматике – часто?
9. Как изменится абсолютное значение геминальной КССВ с увеличением валентного угла центрального атома от 105° до 117° ?
10. Как изменяется величина вицинальной КССВ с увеличением торсионного угла между крайними связями от 0° до 180° ?
11. Как влияют электроотрицательные заместители на величины геминальных и вицинальных КССВ?
12. Как влияет длина средней связи на величину вицинальной КССВ?

Физические основы ЯМР

1. От чего зависит энергетическая разница между спиновыми состояниями ядер?
2. От чего зависит частота ядерного магнитного резонанса тех или иных ядер?
3. Какие значимые в химии природных соединений ядра являются магнитно-активными и имеют спин, равный $1/2$?
4. Каковы особенности спектроскопии ЯМР по квадрупольным ядрам?
5. Чем отличается абсолютная чувствительность ЯМР от относительной?
6. Спектры каких спиновых систем требуют для точного предсказания квантомеханического формализма?
7. Чем продольная релаксация отличается от поперечной?
8. Какой тип релаксации всегда происходит быстрее другого типа релаксации?
9. Как быстрая релаксация проявляется себя в спектрах?
10. Что является причиной появления сателлитов ^{13}C в протонном спектре?
11. Как можно повлиять на эффекты, приносимые в спектр квадрупольными ядрами?

Цифровая обработка данных ЯМР

1. Чем цифровой сигнал отличается от аналогового?
2. Что такое амплитуда, частота и фаза сигнала?
3. Как влияет на спектр ЯМР умножение FID на экспоненту?
4. Как влияет на спектр ЯМР умножение FID на функцию Гаусса?

5. В каких случаях применяется обрезание FID и аподизация?
6. Как можно получить FID из спектра ЯМР?
7. Как можно получить частотный спектр ЯМР из записанного во времени электромагнитного отклика на импульс?
8. Что такое цифровое разрешение?
9. Каковы основные особенности подхода HOSE применительно к предсказанию спектров ЯМР?
10. Каковы основные особенности нейронных сетей применительно к предсказанию спектров ЯМР?

Практическая реализация ЯМР

1. Как рабочая частота спектрометра влияет на вид спектров ЯМР?
2. В каком устройстве происходит облучение образца переменным электромагнитным полем?
3. В каком устройстве происходит считывание электромагнитного отклика образца на импульсное облучение?
4. От каких параметров накопления зависит отношение сигнал/шум?
5. Как связаны время накопления, ширина спектрального окна и число точек FID?
6. Какому критерию должна удовлетворять частота выборки для избежания отраженных сигналов?
7. Чем цифровое разрешение отличается от естественного?
8. Какое устройство позволяет снизить требования к АЦП в миллионы раз?
9. Как подавляются отраженные сигналы в спектрах ЯМР?
10. Зачем нужно квадратурное детектирование?
11. Каково назначение шиммирующих катушек?
12. Каково назначение системы LOCK?
13. Зачем нужно вращение образца вокруг оси Oz?
14. Какова типичная полуширина линии в рутинных экспериментах для образца в DMSO-d6?
15. Что такое фазовый цикл?

Образец для ЯМР

1. Какими преимуществами и недостатками обладает DMSO-d6 как растворитель для ЯМР?
2. Какими преимуществами и недостатками обладает CDCl₃ как растворитель для ЯМР?
3. О чем свидетельствует наличие градиента несимметричных искажений формы линии?
4. Каковы преимущества и недостатки 5-мм ампул по сравнению с 10 мм?
5. Как вязкость растворителя влияет на спектр ЯМР?
6. Сколько вещества нужно для получения спектра ¹³C за несколько часов?

Динамика

1. Почему сигналы $-NH_2$ и $-OH$ групп часто бывают уширены?
2. Что происходит со спектром ЯМР при нагревании образца, атомы которого неэквивалентны лишь с учетом конформации?
3. Что происходит со спектром ЯМР при добавлении воды в образец, имеющий подвижные протоны?
4. Каково характеристическое время ЯМР?
5. Что такое температура коалесценции?
6. Как с помощью ЯМР измерить барьер перехода между двумя состояниями молекулы?
7. Почему протонный спектр этанола не зависит от конформации?
8. Почему при подкислении этанола пропадает КССВ с гидроксильной группой?
9. Как посчитать усредненный химический сдвиг двух состояний протона?

Импульсный ЯМР

1. На какие параметры спектра ЯМР влияет длина импульса и каким образом?
2. Как длина импульса соотносится с его мощностью?
3. Зачем нужна задержка между импульсом и накоплением?
4. Зачем нужна задержка между сканами?
5. На какие параметры спектра ЯМР влияет скорость спадания FID и от чего она зависит?
6. От чего зависит скорость вращения используемой в импульсном ЯМР вращающейся системы координат?
7. От чего зависит угол поворота ВМН сразу после импульса во вращающейся системе координат?
8. Что происходит с заселенностью спиновых уровней при облучении образца 90° -импульсом?
9. Что происходит с вектором макроскопической намагниченности при облучении образца 180° -импульсом?
10. Каковы преимущества импульсного ЯМР перед ЯМР с непрерывной разверткой?
11. Какая функция приближенно описывает спадание огибающей FID?
12. Как называются осцилляции проекции ВМН на горизонтальную плоскость?
13. Расфокусировка каких компонент ВМН устраняется спиновым эхом?
14. Почему спиновое эхо не рефокусирует гетероядерные мультиплеты?
15. Какой части комплексного Фурье-образа соответствует сигнал поглощения?
16. Функцией какого типа описывается сигнал в резонансной катушке, вызванный вращающимся магнитным моментом?
17. Каковы обязательные атрибуты импульсной последовательности в корреляционных экспериментах?

Эксперименты ЯМР

1. К чему приводит широкополосная развязка от протонов в спектре ^{13}C ?
2. Зачем в эксперименте Gated включают развязку перед, но не во время накопления?
3. Какую информацию можно извлечь из спектров селективного двойного резонанса?
4. В каких условиях двойной резонанс лучше COSY?
5. Какую информацию можно извлечь из спектров COSY?
6. Какую дополнительную информацию (по сравнению с COSY) дают корреляционные эксперименты с переносом когерентности?
7. Какую информацию можно извлечь из спектров HSQC?
8. Какую информацию можно извлечь из спектров HMBC?
9. В каких условиях одномерный HMBC лучше двумерного?
10. Какую информацию можно извлечь из спектров TOCSY?
11. Какую информацию можно извлечь из спектров DOSY?
12. Из каких экспериментов можно извлечь гетероядерные KCCB?
13. В чем преимущества эксперимента INEPT перед SPI?
14. Чем отличаются спектры АРТ от спектров INEPT?
15. Какие существуют гетероядерные двумерные эксперименты с переносом когерентности?
16. Для ядер какого типа особенно эффективны эксперименты с переносом поляризации?

Ядерный эффект Оверхаузера

1. Какую информацию можно извлечь из спектров ROESY?
2. Какой тип релаксации приводит к появлению ЯЭО?
3. На каком межзатомном расстоянии наблюдается ЯЭО?
4. Каково максимально возможное значение ядерного эффекта Оверхаузера?
5. Как ЯЭО зависит от частоты спектрометра?
6. Как соотносится фаза диагональных пиков и кросс-пиков ядерного эффекта Оверхаузера в спектрах ROESY?
7. Как соотносится фаза кросс-пиков химического обмена и кросс-пиков ядерного эффекта Оверхаузера в спектрах NOESY?
8. Почему наблюдение ЯЭО в одномерном варианте проводится в разностном режиме?

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендуемая литература

а) основная литература:

1. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. М. , Бином. Лаборатория знаний 2011.

2. Браун, Д. Спектроскопия органических веществ / Д. Браун, А. Флойд, М. Сейнзбери, М., Мир, 1992.
3. В.Т. Панюшкин, Ю.Е. Черныш, В.А. Волынкин, Г.С. Бородкин, И.Г. Бородкина, Ядерный магнитный резонанс в структурных исследованиях М., URSS 2016 344 С
4. А. Дероум "Современная спектроскопия ЯМР в химических исследованиях", М., Мир, 1992
5. Х. Гюнтер "Введение в курс спектроскопии ЯМР", М., Мир, 1984

б) Дополнительная литература

- 1) Эрнст, Р. ЯМР в одном и двух измерениях / Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Бокаун, М., Мир, 1990. Вилков, Л. В. Физические методы исследования в химии / Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин, М., 1987.
- 2) K. Denk "NMR spectroscopy", University of Guelph, 2005
- 3) E. Becker "High resolution NMR: theory and chemical applications", Academic Press, 2009
- 4) J. Lambert, E. Mazzola "Nuclear magnetic resonance spectroscopy", Pearson Education Inc., 2010
- 5) A. Rahman, M. Choudhary "Solving problems with NMR spectroscopy", Karachi, 2009

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Базы данных и информационно-справочные порталы:

- Российский информационный портал в области науки, медицины, технологии и образования – e-library.ru
- Полнотекстовая база данных иностранных журналов – sciencedirect.com
- База данных – scifinder.cas.org
- Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>
- База данных со свободным доступом <http://www.aist.go.jp/>
- Портал фундаментального химического образования России - www.chem.msu.ru
- Программные средства: MS Windows 10 Pro x64; MS Office Professional Plus 2013; ChemDraw 16

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

ИОХ РАН располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки, предусмотренных учебным планом, а также эффективное выполнение диссертационной работы:

Аудитория для проведения лекций, оснащенная компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Инструментальная база ИОХ РАН основана на центре коллективного пользования физическими методами исследования ИОХ РАН. В составе имеющегося оборудования ЯМР-спектрометры фирмы «Брукер»: ЯМР спектрометр AVANCE-II DRX 600 МГц; ЯМР спектрометр AVANCE DRX 500 МГц; ЯМР спектрометр AVANCE-II 300 МГц

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных Приказа Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. N 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)».