Предмет: Основы ЯМР высогого разрешения.

Для 3-4 года обучения в бакалавриате химического факультета университета

Профильный курс

**Блок «Вход».** Входная проверочная работа на выявление общих знаний по физике: тест из 50 простейших вопросов по темам электричество и магнетизм, квантовая механика, атомная и ядерная физика. При наборе более 55% баллов учащийся переходит к изучению модуля, в обратном случае – в модуль актуализации.

**Блок «Обобщения».**

* *Исторический блок.* Лекция, включающая основные исторические этапы развития магнитного резонанса в мире, России и в частности в Казани, обзор исторических приборов и техник снятия спектров. Экскурсия в музей-лабораторию Е. К. Завойского в институте физики КФУ.
* *Блок актуализации.* Лекции, включающие следующие темы: угловой момент количества движения ядер, Ядра в статическом магнитном поле, Энергия ядер в магнитном поле, Макроскопическое намагничивание, Основные принципы эксперимента ЯМР, Импульсный метод ЯМР, Классический и импульсный ЯМР.
* *Экспериментальный блок.* Одна лабораторная работа с последующей защитой.

**Теоретический блок.** Лекции , включающие следующие темы: Параметры спектров ЯМР (ХС, КССВ), Спиновые системы (AX, AXn, AMX, An), Химические сдвиги ЯМР 1Н и 13С в органических соединениях, Спектры ЯМР и молекулярная структура соединений. Эквивалентность, симметрия и хиральность. Спин-спиновое взаимодействие и строение молекул. Введение в динамический ЯМР. Параметры активации. Эксперименты двойного резонанса, Ядерный эффект Оверхаузера.

Контрольная работа (25 баллов) – в случае недобора баллов отправляются в блок ошибок.

**Блок генерализации.**

* *Блок применения.* Семинар с разбором задач приписания простых спектров. Отработка навыков работы с программными пакетами для работы с ЯМР данными.
* *Блок стыковки.* Семинарское занятие по теме применения ЯМР методов совместно с другими физическими методами, а также квантово-химическими расчетами для решения химических проблем.
* *Блок углубления.* Разбор нетривиальных реальных спектров. Демонстрация комбинированного подхода с использованием 1М (с развязкой, без развязки, INEPT, DEPT), 2М (COSY, HMBC, HSQC) спектров и применение ЯОЭ для установления 3М структуры. Дополнительные баллы за полностью приписанные с нуля реальные ЯМР спектры 1Н и 13С конкретного соедиенния.
* *Блок ошибок.* Разбор наиболее частых ошибок. Возможность переписать контрольную работу в случае недобора баллов.

**Блок «Выход»**. Зачета в форме устного опроса по любым темам из модуля. 50 баллов.

**Баллы:** Итоговая оценка состоит из суммы контрольной и лабораторной работ и зачета в форме устного опроса (2\*25+50=100). Набрать дополнительные баллы можно при прохождении блока углубления.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Оценка** | Неуд. | Удов. | Хор. | Отл. |
| **Балл** | <50 | 50-66 | 66-83 | 83-100 |