

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

**Физические методы в катализе и адсорбции:
Основы применения ЯМР и ЭПР
спектроскопии в катализе**

Модульная программа лекционного курса и самостоятельной работы студентов

Курс 4–й, VIII семестр

Учебно-методический комплекс

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов 4-го курса факультета естественных наук, направление подготовки 020201 «Фундаментальная и прикладная химия (специалист)». В состав пособия включены: программа курса лекций "Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе", структура курса и методические указания к подготовке к зачёту. Кроме того, приведен набор типовых вопросов для самостоятельной работы студентов с использованием учебной литературы.

Составители

Талзи Е. П., профессор

© Новосибирский государственный университет, 2014

Содержание

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Место дисциплины в структуре ООП	6
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины	7
4. Структура и содержание дисциплины	9
Рабочий план (по неделям 7-го и 8-го семестров)	9
Программа курса лекций	
I. Основные особенности и значение явлений катализа	10
II. Классификация катализаторов и каталитических процессов	10
III. Сущность каталитического действия	10
IV. Принципы каталитического действия кислот и оснований	11
V. Принципы каталитического действия комплексов металлов	11
VI. Катализ металлами	12
VII. Катализ оксидами	13
VIII. Гетерогенные металлоорганические катализаторы	14
IX. Катализ сульфидами	14
X. Основы предвидения каталитического действия	15
5. Образовательные технологии	15
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины	16
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	18
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины	19

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе» относится к базовой части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020201 Фундаментальная и прикладная химия» (квалификация (степень) специалист). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой катализа и адсорбции.

Содержание дисциплины раскрывает физические принципы ЯМР и ЭПР спектроскопии и даёт представление о тех возможностях, которые даёт использование этих методов для изучения строения катализаторов и механизмов каталитических реакций. В результате освоения дисциплины студенты должны быть готовы самостоятельно анализировать типичные спектры ЯМР и ЭПР, критически оценивать возможности использования радиоспектроскопических методов для решения конкретных задач катализа.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-11, ОК-12, ОК-15, ОК-16; профессиональных компетенций: ПК-3, ПК-4, ПК-5, ПК-7, ПК-11.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, лабораторные работы, консультации, сдача дифференцированного зачёта, самостоятельная работа студента.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль осуществляется путем контроля посещаемости, а также неформализованного опроса студентов по пройденным темам.

Итоговый контроль в конце семестра осуществляется путем дифференцированного зачёта

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу. Всего 38 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены 16 часов лекционных и 12 часов лабораторных работ, а

также 10 часов самостоятельной работы студентов.

1. Цели освоения дисциплины

В результате освоения дисциплины «Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе» студент должен

иметь представление об основах ЭПР и импульсной ЯМР спектроскопии, о возможностях этих видов спектроскопии в исследовании гомогенных и гетерогенных катализаторов, и других химических объектов, знать основную терминологию ЭПР и ЯМР спектроскопии, основные ограничения и пределы применимости методов, уметь интерпретировать сравнительно простые одномерные и двумерные спектры ЯМР и спектры ЭПР жидких и замороженных растворов парамагнитных частиц с одним неспаренным электроном $S = 1/2$.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе» является частью профессионального (специального) цикла ООП, базовая часть (профильные дисциплины), по направлению подготовки «020201 Фундаментальная и прикладная химия», уровень подготовки – «специалист».

Дисциплина «Катализ» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Физическая химия;
- Неорганическая химия;
- Координационная химия;
- Органическая химия;
- ВМС;
- Химия твердого тела;
- Основы компьютерной грамотности;
- ТВС;
- Химическая термодинамика;
- Химическая кинетика;

Результаты освоения дисциплины «Катализ» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Физические методы в катализе и адсорбции;

- Молекулярный дизайн катализаторов;
- Научно-исследовательская практика.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе»:

• общекультурные компетенции:

- *способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, наличием навыков использования программных средств и работы в компьютерных сетях, умением создавать базы специальных данных и использовать ресурсы сети Интернет (ОК-11);*
- *способностью ориентироваться в создающихся условиях производственной деятельности и к адаптации в новых условиях (ОК-12);*
- *способностью самостоятельно применять методы и средства познания, обучения и самоконтроля для приобретения новых знаний и умений, в том числе в новых областях, непосредственно не связанных со сферой деятельности (ОК-15);*
- *способностью в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей (ОК-16);*

• профессиональные компетенции:

- *способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ПК-3);*
- *использованием основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применением методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);*
- *знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, наличием представлений о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания,*

их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-5);

- *пониманием необходимости и способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владением ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-7);*
- *знанием основ теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии) (ПК-11).*

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- понимать физические основы ЯМР и ЭПР спектроскопии;
- уметь критически оценивать возможности использования данных методов для конкретных задач гомогенного и гетерогенного катализа.
- уметь интерпретировать типичные спектры ЯМР на различных ядрах (в том числе двумерные); уметь интерпретировать спектры ЭПР жидких и замороженных растворов.

Программа курса

Лекции 1-4.

1. Электронный и ядерный магнитные моменты.
2. Ядра в магнитном поле.
2. Интенсивность сигнала ЯМР.
3. Электронное экранирование (химический сдвиг).
4. Спин-спиновое взаимодействие.
5. Электронный парамагнитный резонанс. Спин-гамма-тонкое взаимодействие.

Лекции 5-8.

6. Импульсная ЯМР спектроскопия.
7. Векторная модель ЯМР.
8. Химические сдвиги и спин-спиновое взаимодействие в импульсном эксперименте.
9. Спиновое эхо.
10. Временное и частотное представление сигнала ЯМР.
11. Спиновая релаксация.
12. Механизмы релаксации.
13. Детектирование и регистрация ЯМР сигналов.
14. Декаплинг (развязка).
15. Редактирование спектров с помощью спинового эха.

Лекции 9-12

16. Перенос поляризации.
17. Эффект Оверхаузера.

Лекции 13-16

18. ЯМР твёрдого тела.
19. Введение в методы двумерной ЯМР спектроскопии.

Формы организации учебного процесса: лекция, лабораторная работа, самостоятельная работа студента, консультации, зачёт.

5. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий. Обратная связь обеспечивается тем, что лектор может оперативно скорректировать лекционный курс при прохождении контрольных точек результатов в усвоении материала.

В лекционном курсе зачастую используются недавно опубликованные научные результаты или полученные самим лектором и его коллегами по ИК СО РАН.

Преподаватели, участвующие в проведении курса, регулярно готовят и издают учебно-методические пособия, посвященные различным разделам курса. Эти пособия размещаются и в электронном виде на сайте Факультета естественных наук. Там же можно найти мультимедийную презентацию лекционного курса.

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

Рекомендуемый режим работы: лекционные занятия – 3-4 часа в неделю, а также самостоятельные занятия с обязательной и дополнительной литературой.

Аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде дифференцированного зачёта по теме «Основы ЯМР и ЭПР спектроскопии».

Образцы вопросов к зачёту по «Основам ЯМР и ЭПР спектроскопии»

1. Что-такое g-фактор, что такое химический сдвиг. Анизотропия g-фактора и химического сдвига. Характерные g-фактора для радикалов и комплексов переходных металлов с $S = \frac{1}{2}$.
2. Форма линий ЭПР и ЯМР поликристаллических образцов. Определение главных значений тензора химического сдвига и g-фактора из экспериментальных спектров.
3. Связь величины g-фактора с параметрами расщепления d – орбиталей в кристаллическом поле и константой спин орбитального взаимодействия.
4. Уравнение Блоха. Что такое T_1 и T_2 . Почему сигнал ЯМР имеет лоренцеву форму с шириной $1/T_2$.
5. Эффект Оверхаузера. Величина эффекта. Как из данных по эффекту Оверхаузера определить структуру молекулы.
6. Что такое декаплинг.
7. Что такое 90° импульс. Как часто и как долго необходимо оцифровывать спад свободной индукции. Измерение T_1 и T_2 .
8. Перенос поляризации. Селективный перенос поляризации. Процедура INEPT, объяснить на векторной модели принципы работы.
9. Как с помощью J – модуляции различить CH_2 и CH атомы углерода.

10. Основные принципы двумерной J - спектроскопии и двумерной корреляционной спектроскопии. Уметь анализировать простые спектры.
11. Вращение под магическим углом. Для чего нужно вращение и какова должна быть его скорость.
12. Кросс-поляризация. Соотношение Хартмана Хана.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная и дополнительная литература:

1. Резвухин А. И. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса высокого разрешения. Новосибирск: Изд. НГУ, 1979.
 2. Кэррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1973.
 3. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
 4. Степанов А. Г. , Талзи Е. П. ЯМР-спектроскопия. Новосибирск: Изд. НГУ, 1997.
 5. Степанов А. Г. , Талзи Е. П. Практикум по физической химии. ЯМР спектроскопия.
 6. Брыляков К. П. Основы импульсной ЯМР спектроскопии: Изд. НГУ, 2002.
- Талзи Е. П. Основы применения ЯМР и ЭПР спектроскопии в катализе (курс лекций) Издательский отдел Института, Новосибирск 2002 год.
- #### **в) информационно-поисковые системы:**
- Google ScholarSFX - полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах, online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН;
 - SCIRUS -бесплатная поисковая система издательства Elsevier, ориентированная на поиск только научной информации, online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН;
 - SciTopics - новый бесплатный интернет-ресурс для ученых и исследователей при; представлены самая свежая и самая точная взб-информация и информация из периодики; online-доступ со всех компьютеров ИК СО РАН;
2. Библиографические базы данных, к которым существует прямой доступ из внутренней сети Института: "ВИНИТИ", "Current Contents", "Chemical Abstracts", и т.д.;

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Аудиторный фонд (с мультимедийными проекторами, ноутбуками и экранами), компьютерный класс (компьютеры с необходимым ПО), рабочие места с выходом в Интернет, библиотека, информационно-аналитический центр – в ИК СО РАН. Возможность проведения лабораторных работ на ЭПР спектрометре Bruker ER-200D в ЯМР спектрометре Bruker DPX-250

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020201 Фундаментальная и прикладная химия».

Авторы: Галзи Евгений Павлович, д.х.н., профессор., заведующий лабораторией ИМКР ИК СО РАН



подпись

Программа одобрена на заседании кафедры катализа и адсорбции ФЕН "21" апреля 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н., ассистент  И.В. Делий