

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 29.05.2023 14:18:39

Уникальный программный ключ:

ca953a0120d891083f939673078e182989aef8a

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»

Факультет физико-математических и естественных наук

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Основы ЯМР

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.03.01 «Химия»

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

«Химия»

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2023 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Основы ЯМР» является формирование у студентов бакалавриата навыков установления строения вещества с помощью расшифровки спектров ядерного магнитного резонанса (далее ЯМР). Наибольшее внимание уделяется спектроскопии ЯМР ^1H и ^{13}C органических соединений. Также рассматривается спектроскопия ЯМР на менее распространённых ядрах ^{19}F .

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Основы ЯМР» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ОПК-1	Способность анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов;
		ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.
ОПК-3	Способность применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности
ПК-1	Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования;
		ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности;
		ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин.
ПК-4	Способность использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности	ПК-4.2. Владеет навыками использования современных методов и аппаратуры для изучения химических процессов, строения и свойств химических соединений.

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Основы ЯМР» относится к вариативной компоненте блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Основы ЯМР».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
Общепрофессиональные компетенции			
ОПК-1	Способность анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия Компьютерные технологии в химии	Хроматография Основы масс-спектрометрии Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Преддипломная практика Научно-исследовательская работа
ОПК-3	Способность применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Информатика Основы квантовой химии Компьютерные технологии в химии	Хроматография Основы масс-спектрометрии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ПК-1	Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Неорганическая химия Аналитическая химия Физическая химия Органическая химия История химии Основы квантовой химии Учебная практика	Хроматография Основы масс-спектрометрии Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ПК-4	Способность использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия	Хроматография Основы масс-спектрометрии Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Основы ЯМР» составляет 2 зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		7			
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	<i>54</i>	<i>54</i>			
в том числе:					
Лекции (ЛК)					
Лабораторные работы (ЛР)	54	54			
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	<i>18</i>	<i>18</i>			
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>					
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72		
	зач.ед.	2	2		

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Раздел 1. Введение и теоретические основы метода ЯМР	Тема 1.1. ЯМР спектроскопия и её место среди физических методов изучения процессов и продуктов органической химии. Элементы теории явления ЯМР.	ЛР
	Тема 1.2. Устройство приборов ЯМР.	ЛР
	Тема 1.3. Спиновые числа и магнитный момент атомов, эффект Зеемана. Условия магнитного резонанса. Времена продольной и поперечной релаксации.	ЛР
Раздел 2. Параметры спектров ЯМР ^1H и ^{13}C	Тема 2.1. Применяющиеся растворители, внутренний и внешний стандарты. Интегрирование.	ЛР
	Тема 2.2. Параметры спектров ЯМР, их информативность. Ширина и интенсивность линии ЯМР.	ЛР
	Тема 2.3. Химический сдвиг. Химические сдвиги ядер ^1H и ^{13}C органических молекул. Понятие о тонкой структуре спектров ЯМР ^1H и ^{13}C , КССВ.	ЛР
Раздел 3. Спин-спиновое взаимодействие	Тема 3.1. Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ^1H , ^{13}C и ^{19}F . КССВ ^1H - ^1H , ^1H - ^{13}C , ^{13}C - ^{13}C .	ЛР
Раздел 4. Зависимость КССВ от пространственного положения взаимодействующих ядер	Тема 4.1. Зависимость величины КССВ ^1H - ^1H от взаимного расположения взаимодействующих протонов.	ЛР
	Тема 4.2. 2J , 3J , 4J , 5J . Характеристичные КССВ (<i>цис</i> -, <i>транс</i> -алкены, ароматические протоны, производные циклогексана) Зависимость Карплуса. Практическое применение.	ЛР
Раздел 5. Особенности ЯМР различных классов органических соединений	Тема 5.1. Характеристичные сигналы в протонных и углеродных спектрах алкенов, алкинов, аренов, карбоновых кислот и карбонильных соединений. Их использование для установления структуры.	ЛР
Раздел 6. Вид и расшифровка спектров ЯМР ^1H	Тема 6.1. Положение резонансных сигналов групп в протонных спектрах. Зависимость химического сдвига от химического окружения.	ЛР
Раздел 7. Химический сдвиг	Тема 7.1. Интерпретация структуры органических соединений в спектрах без КССВ с использованием ЯМР ^1H и элементного анализа. Число ненасыщенности.	ЛР
Раздел 8. Расшифровка спектров с использованием химического сдвига и КССВ ЯМР ^1H	Тема 8.1. Основные виды мультиплетов в спектрах ЯМР ^1H . Примеры КССВ ^1H - ^1H в различных классах органических соединений.	ЛР
	Тема 8.2. Определение структуры неизвестных соединений по спектрам ЯМР ^1H (брутто-формула дана).	ЛР

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Раздел 9. Углеродные спектры	Тема 9.1. Спектры ЯМР ^{13}C . Их роль в установлении структуры органических соединений. Диапазон химических сдвигов.	ЛР
	Тема 9.2. Неразвязанный спектр ^{13}C , зависимость КССВ ^1H - ^{13}C от химического окружения. Спектр ^{13}C с полной развязкой от протонов (палочковый спектр).	ЛР
Раздел 10. Расшифровка спектров неизвестных соединений с использованием спектров ЯМР ^1H и ^{13}C	Тема 10.1. Определение пространственного строения органических соединений по совокупности данных ЯМР ^1H и ^{13}C с учётом величин КССВ.	ЛР
Раздел 11. Параметры спектров ЯМР ^{19}F	Тема 11.1. Химические сдвиги ядер ^{19}F органических молекул. Вид резонансных сигналов. Область применения, ограничения.	ЛР

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Комплект специализированной мебели; специализированное оборудование химической лаборатории: ИК-фурье спектрометр BRUKER "MPA", хромато-масс-спектрометр FOCUS-DSQ с турбомолекулярным насосом 250л/с, газовый баллон (гелий), вытяжной шкаф, кондиционер, компьютер, имеется wi-fi В ЯМР спектроскопии используются приборы Научно-образовательного центра коллективного пользования РУДН: http://www.rudn.ru/index.php?pagec=5972 , а также ЦКП (НОЦ) РУДН: http://ccp.rudn.ru/?pagec=940 . Лабораторные работы проводятся в здании ЦКП (НОЦ) РУДН под руководством сотрудников центра, которые оснащены ЯМР-спектрометрами Jeol «JNM-ECA 600» и Jeol «JNM-ECA 400».
Для самостоятельной	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может)	

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
работы обучающихся	использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1981.

Дополнительная литература:

1. Зайцев Б.Е. Основы ЯМР-спектроскопии: Конспект лекций / Б.Е. Зайцев. - М.: Изд-во РУДН, 2009.
2. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях: Пер. с англ. под ред. К. М. Салихова, М.: Мир, 1990.
3. Сергеев Н. М. Спектроскопия ЯМР (для химиков органиков): М.: Издательство МГУ, 1981.
4. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
5. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР: Пер. с англ. М.: Мир, 1984.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:
 - Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН <http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>
 - База данных Scopus <https://www.scopus.com/>
 - База данных Web of Science http://apps.webofknowledge.com/WOS_GeneralSearch_input.do?product=WOS&search_mode=GeneralSearch&SID=N1cZ3JYECIUJdm14VTK&preferencesSaved
 - Organic Chemistry Portal <http://www.organic-chemistry.org/>
 - База данных Reaxys <https://www.reaxys.com/reaxys/secured/search.do>
2. Базы данных и поисковые системы:
 - электронный фонд правовой и нормативно-технической документации <http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>
- поисковая система Google <https://www.google.ru/>
- реферативная база данных SCOPUS
<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:

1. Лабораторный практикум по дисциплине «Основы ЯМР».

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Основы ЯМР» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

РАЗРАБОТЧИКИ:

**Доцент кафедры
органической химии**



Зубков Ф.И.

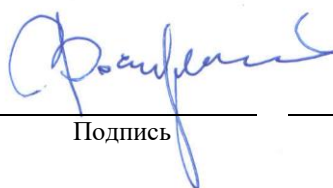
Должность, БУП

Подпись

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Кафедра органической химии



Воскресенский Л.Г.

Наименование БУП

Подпись

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

**Заведующий кафедрой
неорганической химии**



Хрусталеv В.Н.

Должность, БУП

Подпись

Фамилия И.О.