

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 15.05.2026 12:28:37

Уникальный программный ключ:

ca953a01204891083f939673078ef1a989dae18a

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

ЯМР ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.04.01 ХИМИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «ЯМР органических соединений» входит в программу магистратуры «Фундаментальная и прикладная химия» по направлению 04.04.01 «Химия» и изучается во 2 семестре 1 курса. Дисциплину реализует Кафедра органической химии. Дисциплина состоит из 8 разделов и 13 тем и направлена на изучение программы триал для обработки спектров ЯМР

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов навыков установления структур сложных органических соединений при помощи расшифровки спектров ядерного магнитного резонанса (далее ЯМР) в программе Триал, позволяющие производить редактирование фидов. □ Данные навыки имеют колоссальное прикладное значение, поскольку каждый химик-синтетик стоит перед задачей установления и доказательства структуры, полученных в ходе эксперимента данных. Наибольшее внимание уделяется спектроскопии ЯМР ¹H и ¹³C органических соединений.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «ЯМР органических соединений» 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)
ПК-1	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-1.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов;
ПК-2	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-2.2 Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «ЯМР органических соединений» относится к блоку по выбору блока образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «ЯМР органических соединений».

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

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ПК-1	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	<p>Научно -исследовательская работа;</p> <p>Экспериментальные методы исследования в химии;</p> <p>Методы органической химии;</p> <p>Основы биотехнологии;</p> <p>Methods of Organic Chemistry;</p> <p>Fundamentals of Biotechnology;</p> <p>Спектральные методы в неорганической химии;</p> <p>Химия координационных соединений;</p> <p>Резонансные методы в химии;</p> <p>Кинетика элементарных реакций;</p> <p>Термодинамика неравновесных процессов;</p> <p>Статистическая термодинамика;</p> <p>Катализ;</p>	<p>Научно -исследовательская работа;</p> <p>Преддипломная практика;</p> <p>Химия природных соединений;</p> <p>Основы дизайна лекарственных препаратов;</p> <p>Химия гетероциклических соединений;</p> <p>Fundamentals of design of drugs;</p> <p>Chemistry of Heterocyclic Compounds;</p> <p>Бионеорганическая химия;</p> <p>Современные проблемы менеджмента в химии;</p> <p>Химия окружающей среды;</p> <p>Сtereoхимия;</p> <p>Химия твердого тела;</p> <p>Применение хроматографии в катализе;</p> <p>Stereochemistry;</p> <p>Chemistry of Natural Compounds;</p> <p>Металлоорганическая химия;</p>
ПК-2	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	<p>Экспериментальные методы исследования в химии;</p> <p>Теоретическая органическая химия;</p> <p>Theoretical organic chemistry;</p> <p>Электрохимические методы исследования;</p> <p>Резонансные методы в химии;</p> <p>Научно -исследовательская работа;</p>	<p>Термоаналитические методы в химии;</p> <p>Сtereoхимия;</p> <p>Химия твердого тела;</p> <p>Применение хроматографии в катализе;</p> <p>Stereochemistry;</p> <p>Масс-спектрометрия органических соединений;</p> <p>Mass spectrometry of organic compounds;</p> <p>Современные проблемы менеджмента в химии;</p> <p>Физические методы исследования в катализе;</p> <p>Научно -исследовательская работа;</p> <p>Преддипломная практика;</p>

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «ЯМР органических соединений» составляет «3» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			2
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	54		54
Лекции (ЛК)	36		36
Лабораторные работы (ЛР)	18		18
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	18		18
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	36		36
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	108	108
	зач.ед.	3	3

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Введение и теоретические основы метода ЯМР	1.1	ЯМР спектроскопия и её место среди физических методов изучения процессов и продуктов органической химии. Элементы теории явления ЯМР.	Место ЯМР среди физических методов изучения органических соединений. Сравнение с ИК, УФ и масс-спектрометрией. Уникальность метода для изучения динамики, конформаций и электронного окружения атомов в растворе. Неразрушающий характер ЯМР и возможность отслеживания кинетики реакций в реальном времени. Макроскопическая намагниченность образца как основа регистрируемого сигнала. Квантование энергии спинов во внешнем магнитном поле, образование двух энергетических уровней для ядер со спином 1/2.	ЛК, ЛР
		1.2	История развития метода (И. Раби, Ф. Блох, Э. Пёрселл). Спиновые числа и магнитный момент атомов, эффект Зеемана, Ларморовские частоты.	Эксперименты Раби в молекулярных пучках. Независимое открытие ЯМР в конденсированных средах Блохом и Пёрселлом. Спиновое число I и его связь с наличием магнитного момента у ядра. Отсутствие магнитного момента у чётно-массовых ядер с нулевым спином. Эффект Зеемана - расщепление ядерных энергетических уровней в постоянном магнитном поле. Ларморова частота как частота прецессии ядерного магнитного момента вокруг направления внешнего поля, пропорциональность напряжённости поля и гиромагнитному отношению.	ЛК, ЛР
		1.3	Условия магнитного резонанса. Спад свободной индукции. Времена продольной и поперечной релаксации.	Условие возникновения магнитного резонанса: равенство частоты радиочастотного поля ларморовой частоте прецессии. Спад свободной индукции (FID) как затухающий сигнал после радиочастотного импульса. Фурье-преобразование FID для получения частотного спектра. Продольная релаксация (время T1) - восстановление равновесной населённости уровней за счёт обмена энергией с окружением. Поперечная релаксация (время T2) - дефазировка спинов в поперечной плоскости и потеря фазовой когерентности, связь с шириной линии спектра.	ЛК, ЛР
Раздел 2	Строение ЯМР-спектрометра	2.1	Виды ЯМР-спектрометров. Принципиальная схема работы аппарата. Возможности.	Спектрометры непрерывного излучения (CW) и импульсные спектрометры с Фурье-преобразованием. Сверхпроводящие магниты для создания сильного и стабильного поля. Принципиальная схема: магнит, датчик с образцом, синтезатор частот, усилитель, аналого-цифровой преобразователь и	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				компьютер. Вращение образца в датчике для усреднения неоднородностей магнитного поля.	
		2.2	Описание метода проведения анализа, выходные данные, полученные после снятия спектра.	Растворение образца в дейтерированном растворителе, использование сигнала дейтерия для стабилизации резонансного условия (лок). Процедура шугирования для достижения однородности магнитного поля. Получение первичных данных в виде интерферограммы (FID) во временной области. Преобразование FID в частотный спектр с осями в миллионных долях и герцах. Выходные данные: набор сигналов с определёнными положениями, интенсивностями и мультиплетностью.	ЛК, ЛР
Раздел 3	Параметры спектров ЯМР ¹ H и ¹³ C	3.1	Применяющиеся растворители, внутренний и внешний стандарты. Параметры спектров ЯМР, их информативность. Ширина и интенсивность линии ЯМР.	Дейтерированные растворители (CDCl ₃ , D ₂ O, DMSO-d ₆ , C ₆ D ₆) и их остаточные протонные сигналы. Внутренний стандарт (обычно ТМС с δ = 0 м.д.), добавляемый непосредственно в образец. Внешний стандарт в коаксиальной ампуле как менее распространённый вариант. Параметры спектров: химический сдвиг (δ), константа спин-спинового взаимодействия (J), интенсивность сигнала (пропорциональная числу ядер), ширина линии на полувысоте (Δν _{1/2}). Связь ширины линии с временем поперечной релаксации T ₂ . Уширение линий из-за химического обмена, неоднородности магнитного поля или присутствия парамагнитных примесей.	ЛК, ЛР
		3.2	Интегрирование. Химический сдвиг. Химические сдвиги ядер ¹ H и ¹³ C органических молекул.	Интегрирование сигналов: площадь под пиком прямо пропорциональна числу резонирующих ядер. Ступенчатая интегральная кривая как способ отображения относительного количества протонов для каждой группы сигналов. Химический сдвиг (δ) в миллионных долях как безразмерная величина, не зависящая от напряжённости внешнего поля. Связь химического сдвига с электронным экранированием ядра. Типичные диапазоны химических сдвигов для протонов (0–12 м.д.) и для углерода-13 (0–220 м.д.). Влияние электроноакцепторных заместителей: дезэкранирование и сдвиг сигнала в область более низкого поля (большие значения δ).	ЛК, ЛР
		3.3	Понятие о тонкой структуре спектров ЯМР ¹ H и ¹³ C, КССВ. Спин-спиновое	Тонкая структура спектров (мультиплеты) как результат расщепления сигналов под действием соседних магнитных	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
			взаимодействие.	ядер. Константа спин-спинового взаимодействия (J, измеряемая в герцах), её независимость от внешнего магнитного поля. Правило (n+1) для мультиплетности в простых спиновых системах: синглет, дублет, триплет, квартет. Широкополосная развязка от протонов при регистрации спектров ¹³ C для подавления расщепления и получения синглетных сигналов. Вицинальные, геминальные и дальние константы КССВ. Уравнение Карплюса для вицинальных констант: зависимость J от двугранного угла и использование для определения конформаций.	
Раздел 4	Особенности ЯМР различных классов органических соединений	4.1	Характеристичные сигналы в протонных и углеродных спектрах алкенов, алкинов, аренов, карбоновых кислот и карбонильных соединений. Их использование для установления структуры.	Характеристичные сигналы в протонных спектрах алкенов: протоны при двойной связи в области 4.5–6.5 м.д. Сигналы в углеродных спектрах алкенов: sp ² -гибридизованные атомы углерода в диапазоне 110–150 м.д. Алкины: ацетиленовый протон в области 2–3 м.д. (сильное высокопольное смещение по сравнению с алкенами). Арены: ароматические протоны в интервале 6.5–8.5 м.д., ароматические атомы углерода в области 120–140 м.д. Карбоновые кислоты: сильно дезэкранированный протон карбоксильной группы в области 10–13 м.д. Карбонильные соединения: сигнал углерода карбонильной группы в самой низкопольной области 160–220 м.д. Использование этих характеристичных диапазонов для идентификации фрагментов структуры неизвестного соединения.	ЛК, ЛР
Раздел 5	Программа Триал	5.1	Ознакомление и основные приемы работы в программах Триал: фурье-преобразование спектров, настройка фаз 1-ого и 2-ого порядков, интегрирование, соотнесение сигналов, редактирование спектров и т.д.	Основные приёмы работы в программе Триал. Выполнение Фурье-преобразования для перевода FID в частотный спектр. Настройка фазы первого и второго порядков для коррекции фазовых искажений. Интегрирование сигналов для определения относительного числа ядер. Соотнесение сигналов в спектре с конкретными атомами в структуре. Редактирование спектров: масштабирование, маркировка пиков, экспорт данных.	ЛК, ЛР
Раздел 6	Расшифровка ¹ H спектров неизвестных соединений	6.1	Преобразование фидов ЯМР ¹ H для дальнейшей работы со спектром: определение пространственного строения органических соединений по данным	Преобразование FID спектров протонного ЯМР для последующего анализа. Обработка спектральных данных с целью извлечения информации о пространственном строении. Определение конформаций органических соединений на основе	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				протонных спектров. Использование величин химических сдвигов и мультиплетности для оценки взаимного расположения атомов в пространстве.	
Раздел 7	Расшифровка ^{13}C спектров неизвестных соединений	7.1	Преобразование фидов ЯМР ^1H для дальнейшей работы со спектром: определение пространственного строения органических соединений по данным ЯМР ^{13}C .	Преобразование FID спектров углеродного ЯМР для последующей работы. Получение и обработка спектров ^{13}C . Определение пространственного строения органических соединений по данным углеродной спектроскопии. Учёт особенностей спектров ^{13}C : широкий диапазон химических сдвигов, чувствительность к конформационным изменениям, отсутствие или наличие расщепления в зависимости от режима регистрации.	ЛК, ЛР
Раздел 8	Расшифровка спектров неизвестных соединений по совокупности данных ЯМР.	8.1	Преобразование фидов ЯМР ^1H для дальнейшей работы со спектром: определение пространственного строения органических соединений по совокупности данных ЯМР ^1H и ^{13}C с учётом величин КССВ.	Совместная обработка и интерпретация данных протонного и углеродного ЯМР. Преобразование FID для обоих типов ядер. Использование величин констант спин-спинового взаимодействия для определения пространственной структуры. Анализ КССВ между протонами, а также долговязевых взаимодействий. Учёт зависимости викальных КССВ от двугранного угла для установления конформаций. Построение трёхмерной структуры органического соединения на основе совокупности данных ^1H и ^{13}C .	ЛК, ЛР

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

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)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор BENQ MX661, проектор NEC NP40, экран моторизованный для проекторов, столы; имеется wi-fi
Компьютерный класс	Компьютерный класс для проведения занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная персональными компьютерами (в количестве ____ шт.), доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	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 работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор BENQ MX661, проектор NEC NP40, экран моторизованный для проекторов, столы; имеется wi-fi

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1981.
2. Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д. Спектрометрическая идентификация органических соединений. – 2011.

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.

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>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>
- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>
- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru
- ЭБС «Троицкий мост»

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. Курс лекций по дисциплине «ЯМР органических соединений».

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

РАЗРАБОТЧИК:

Профессор

Должность, БУП

Подпись

Зубков Федор Иванович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой

Должность БУП

Подпись

Воскресенский Леонид

Геннадьевич

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой

Должность, БУП

Подпись

Воскресенский Леонид

Геннадьевич

Фамилия И.О.