

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 15.05.2026 12:05:31
Уникальный программный ключ:
ca953a01204891083f939673078ef1a989aae18a

**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)

2026 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Основы ЯМР» входит в программу бакалавриата «Химия» по направлению 04.03.01 «Химия» и изучается в 7 семестре 4 курса. Дисциплину реализует Кафедра органической химии. Дисциплина состоит из 11 разделов и 18 тем и направлена на изучение основных терминов и понятий ядерного магнитного резонанса, теоретических основ и экспериментального оформления метода.

Целью освоения дисциплины 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	Способен 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	Способен 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	Способен 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	Способен использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-4.2 Владеет навыками использования современных методов и аппаратуры для изучения химических процессов, строения и свойств химических соединений;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Основы ЯМР» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования 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*
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Учебная практика; Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия; Физическая химия; Химическая технология; Строение вещества; Основы квантовой химии; Высокомолекулярные соединения; Компьютерные технологии в химии;	Научно -исследовательская работа; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии;
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Цифровая грамотность; Основы квантовой химии; Компьютерные технологии в химии;	Научно -исследовательская работа;
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Учебная практика; Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия; Физическая химия; Химическая технология; Введение в специальность; Строение вещества; Основы квантовой химии; Высокомолекулярные соединения; <i>Введение в химию координационных соединений**;</i> <i>Основы нанохимии**;</i> <i>Химия лекарственных веществ**;</i>	Научно -исследовательская работа; Преддипломная практика; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии;
ПК-4	Способен использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	Неорганическая химия; Органическая химия; Аналитическая химия; Физическая химия;	Научно -исследовательская работа; Преддипломная практика; Экспериментальные методы исследования в химии;

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

** - элективные дисциплины /практики

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 образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			7
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	54		54
Лекции (ЛК)	0		0
Лабораторные работы (ЛР)	54		54
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	18		18
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	0		0
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	2

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-спектроскопии среди физических методов анализа органических соединений (ИК, УФ, масс-спектрометрия, КД) - уникальная способность получать информацию о строении углеродного скелета, окружении атомов и динамике молекул. Элементы теории: ядерный спин, магнитный момент, поведение ядер во внешнем магнитном поле, резонансное поглощение радиочастотного излучения. Сравнение ЯМР с другими методами по информативности, чувствительности, необходимости интерпретации спектров. Роль ЯМР в современной органической химии для доказательства строения, контроля чистоты, изучения конформаций и реакционных механизмов.	ЛР
		1.2	Устройство приборов ЯМР	Устройство ЯМР-спектрометра. Импульсный режим (FT NMR) вместо непрерывного сканирования, преимущества (быстрота, накопление сигналов, двумерные методики). Автоматический пробообменник, системы термостатирования, дейтериевая стабилизация резонансных условий. Современные приборы: 400–1200 МГц по протону, криопробные технологии для повышения чувствительности.	ЛР
		1.3	Спиновые числа и магнитный момент атомов, эффект Зеемана. Условия магнитного резонанса. Времена продольной и поперечной релаксации.	Спиновые числа I ядер: для ^1H и ^{13}C -1/2, для ^2H -1, для ^{14}N -1, для ^{19}F -1/2. Магнитный момент ядра, гиромагнитное отношение, связь с чувствительностью в ЯМР. Эффект Зеемана -расщепление энергетических уровней ядер в магнитном поле на $2I+1$ подуровней. Условия магнитного резонанса: равенство энергии кванта радиочастотного поля и разности энергий между уровнями. Времена продольной и поперечной релаксации -возврат к равновесному состоянию после импульса, влияние на ширину линий и скорость регистрации спектров.	ЛР
Раздел 2	Параметры спектров ЯМР ^1H и ^{13}C	2.1	Применяющиеся растворители, внутренний и внешний стандарты. Интегрирование.	Растворители для ЯМР: дейтерированные (CDCl_3 , D_2O , C_6D_6 , CD_3OD , $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, CD_3CN , $\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$) для исключения сигналов протонов растворителя, остаточные сигналы протонов в частично дейтерированных растворителях. Внутренний	ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				стандарт -вещество, добавляемое в раствор (TMS - тетраметилсилан, DSS, диоксан). Внешний стандарт -капсула с эталонным веществом, помещаемая в ампулу. Интегрирование -площадь под сигналом пропорциональна числу эквивалентных ядер данного типа, автоматическое вычисление соотношения протонов в разных группах.	
		2.2	Параметры спектров ЯМР, их информативность. Ширина и интенсивность линии ЯМР.	Параметры спектров ЯМР: химический сдвиг (δ , м.д.), константа спин-спинового взаимодействия (J, Гц), интенсивность (высота и площадь сигнала), ширина линии на полувысоте ($\Delta\nu_{1/2}$). Информативность параметров: химический сдвиг -тип и окружение ядра, J -взаимное расположение ядер, ширина линии -подвижность и релаксационные свойства. Ширина линии: узкие сигналы для малых молекул, уширение при увеличении вязкости, агрегации, обменных процессах. Интенсивность линии -пропорциональна концентрации и числу ядер, чувствительность метода.	ЛР
		2.3	Химический сдвиг. Химические сдвиги ядер ^1H и ^{13}C органических молекул. Понятие о тонкой структуре спектров ЯМР ^1H и ^{13}C , КССВ.	Химический сдвиг (δ) -смещение резонансной частоты ядра относительно стандарта (TMS, $\delta = 0$ м.д.), зависит от локального магнитного поля (экранирование и дезэкранирование электронами). Химические сдвиги протонов ^1H : 0–14 м.д. (алкильные СН -0,5–2,5; СН при sp^2 -4,5–6,5; СНО -9–10; СООН -10–13). Химические сдвиги углерода ^{13}C : 0–220 м.д. (алканы 0–40; алкены 100–150; карбонилы 170–220). Тонкая структура спектров ^1H -мультиплетность (дублет, триплет, квартет, мультиплет) из-за спин-спинового взаимодействия. Тонкая структура спектров ^{13}C -без развязки сложные мультиплеты от соседних протонов.	ЛР
Раздел 3	Спин-спиновое взаимодействие	3.1	Спин-спиновое взаимодействие в спектрах ^1H , ^{13}C и ^{19}F . КССВ ^1H - ^1H , ^1H - ^{13}C , ^{13}C - ^{13}C .	Спин-спиновое взаимодействие -передача информации о спиновом состоянии соседних ядер через электроны связей (эффект не зависит от внешнего магнитного поля). Константа спин-спинового взаимодействия.	ЛР
Раздел 4	Зависимость КССВ от пространственного положения взаимодействующих ядер	4.1	Зависимость величины КССВ ^1H - ^1H от взаимного расположения взаимодействующих протонов.	Зависимость величины вичинальной КССВ (3J) от двугранного угла между взаимодействующими протонами (H-C-C-H). Уравнение Карплуса. Использование зависимости Карплуса для определения конформации и конфигурации органических соединений	ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
		4.2	2 J, 3 J, 4 J, 5 J. Характеристичные КССВ (цис-, транс-алкены, ароматические протоны, производные циклогексана) Зависимость Карплуса. Практическое применение.	Геминальная КССВ (2J): для CH_2 групп от -20 до $+20$ Гц, зависит от электроотрицательности заместителей и гибридизации (в спиртах, эфирах, галогенидах). Вицинальная КССВ (3J) для алкенов: транс- $^3J = 15-18$ Гц, цис- $^3J = 6-12$ Гц, используется для определения конфигурации двойной связи. Дальние КССВ (4J , 5J): через четыре связи (аллильная, W-образная в бициклах), через пять связей. Характеристичные КССВ в ароматических соединениях: орто- ($6-9$ Гц), мета- ($2-3$ Гц), пара- ($0-1$ Гц). В производных циклогексана -различие 3J для аксиальных и экваториальных протонов. Применение зависимости Карплуса и характеристичных J для установления пространственного строения.	ЛР
Раздел 5	Особенности ЯМР различных классов органических соединений	5.1	Характеристичные сигналы в протонных и углеродных спектрах алкенов, алкинов, аренов, карбоновых кислот и карбонильных соединений. Их использование для установления структуры.	Характеристичные химические сдвиги в ^1H -спектрах алкенов: винильные протоны, сдвиг зависит от заместителей (доноры смещают вверх, акцепторы -вниз). В спектрах алкинов: ацетиленовые протоны ($2,0-3,0$ м.д., резкий синглет). Мультиплетность и КССВ для моно-, ди- и полизамещённых бензолов. Характеристичные сдвиги в ^{13}C -спектрах. Использование характеристичных для установления структуры органических соединений.	ЛР
Раздел 6		6.1	Положение резонансных сигналов групп в протонных спектрах. Зависимость химического сдвига от химического окружения.	Положение резонансных сигналов протонов в зависимости от химического окружения: влияние электроотрицательности заместителей. Эффекты анизотропии: ароматический ток, эффект тройной связи, эффект карбонильной группы. Водородная связь (уширение и смещение сигналов ОН, NH вниз до $5-15$ м.д. в зависимости от концентрации). Инкрементные схемы расчёта химических сдвигов (правила Шулеры для замещённых этанов, бензолов, алкенов).	ЛР
Раздел 7		7.1	Интерпретация структуры органических соединений в спектрах без КССВ с использованием ЯМР ^1H и элементного анализа. Число ненасыщенности.	Интерпретация структуры органических соединений по спектрам ^1H ЯМР без учёта спин-спинового взаимодействия (только химические сдвиги и интегральные интенсивности) в сочетании с данными элементного анализа. Расчёт числа ненасыщенности (степени ненасыщенности, индекса дефицита водорода) по брутто-формуле. Соотношение интегральных интенсивностей сигналов как число протонов каждого типа. Определение функциональных групп по характерным	ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
				химическим сдвигам (ОН, NH, CHO, CH ₃ O, CH ₃ N, CH–Hal). Построение структурных фрагментов и их соединение в полную структуру.	
Раздел 8		8.1	Основные виды мультиплетов в спектрах ЯМР 1 Н. Примеры КССВ 1 Н- 1 Н в различных классах органических соединений.	Основные виды мультиплетов в спектрах ¹ Н ЯМР: синглет (s), дублет (d), триплет (t), квартет (q), дублет дублетов (dd), дублет триплетов (dt), триплет дублетов (td), мультиплет (m). Правило n+1 для систем с эквивалентными соседними протонами (расщепление на n+1 линий). Примеры КССВ ¹ Н- ¹ Н в алканах: CH ₃ –CH ₂ (триплет + квартет), CH ₃ –CH (дублет + гептет). В алканах: вицинальные транс и цис КССВ, геминальные КССВ для =CH ₂ . В ароматических соединениях: орто-, мета-, пара-расщепления. В спиртах и аминах: обмен протонов ОН и NH (упрощение мультиплетности, иногда уширенный синглет).	ЛР
		8.2	Определение структуры неизвестных соединений по спектрам ЯМР 1 Н (брутто-формула дана).	Определение структуры неизвестных соединений по спектрам ¹ Н ЯМР при известной брутто-формуле. Алгоритм: расчёт числа ненасыщенности, анализ химических сдвигов для выявления функциональных групп, определение числа неэквивалентных протонов (количество сигналов), соотношение интегральных интенсивностей, анализ мультиплетности (КССВ) для установления числа соседних протонов и взаимного расположения групп. Построение структурного фрагмента, проверка соответствия брутто-формуле и числу ненасыщенности. Примеры для простых молекул: этанол, ацетон, этилбензол, акрилонитрил, дихлорэтан.	ЛР
Раздел 9		9.1	Спектры ЯМР ¹³ С. Их роль в установлении структуры органических соединений. Диапазон химических сдвигов.	Роль спектров ¹³ С ЯМР в установлении структуры органических соединений: высокая разрешающая способность (различаются все неэквивалентные атомы углерода), большой диапазон химических сдвигов (0–220 м.д.), отсутствие расщепления в протонно-развязанных спектрах (палочковый спектр). Диапазон химических сдвигов ¹³ С: алифатические sp ³ (0–90), спирты и эфиры (50–80), амины (40–60), алкены (100–150), арены (120–140), нитрилы (110–130), карбонилы (170–220). Определение числа неэквивалентных углеродных атомов по количеству сигналов. Использование DEPT-экспериментов для различения CH, CH ₂ , CH ₃ и четвертичных углеродов.	ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
		9.2	Неразвязанный спектр ^{13}C , зависимость КССВ ^1H - ^{13}C от химического окружения. Спектр ^{13}C с полной развязкой от протонов (палочковый спектр).	Неразвязанный спектр ^{13}C (без подавления связи с протонами): мультиплетность сигналов от ^1J . Зависимость ^1J ($\text{C}-\text{H}$) от гибридизации углерода: sp^3 . Спектр ^{13}C с полной развязкой от протонов (широкополосная развязка). Режим частичной развязки (DEPT, APT) для определения числа связанных протонов.	ЛР
Раздел 10		10.1	Определение пространственного строения органических соединений по совокупности данных ЯМР ^1H и ^{13}C с учётом величин КССВ.	Определение пространственного строения органических соединений по совокупности данных ^1H и ^{13}C ЯМР с учётом величин КССВ (^3J $\text{H}-\text{H}$, ^3J $\text{C}-\text{H}$, ^2J $\text{C}-\text{H}$, ^3J $\text{C}-\text{C}-\text{H}$). Использование зависимости Карплуса для установления двугранных углов и конформаций (циклогексаны, углеводы, стероиды, пептиды). Ядерный эффект Оверхаузера (NOE) - пространственное сближение ядер (расстояние $< 5 \text{ \AA}$) независимо от числа связей, позволяет определить пространственную близость заместителей. Применение NOESY (2D) для установления стереохимии в сложных молекулах (алкалоиды, олигосахариды, олигонуклеотиды). Определение конфигурации двойных связей (цис/транс) по ^3J $\text{H}-\text{H}$ и NOE.	ЛР
Раздел 11		11.1	Химические сдвиги ядер ^{19}F органических молекул. Вид резонансных сигналов. Область применения, ограничения.	Химические сдвиги ядер ^{19}F . Диапазон химических сдвигов ^{19}F : от -200 до $+200$ м.д. относительно CFCl_3 (стандарт), сильная зависимость от окружения. Вид резонансных сигналов: расщепление от соседних протонов ($^1\text{H}-^{19}\text{F}$ КССВ, ^2J , ^3J , ^4J , характерные значения) и фтора ($^{19}\text{F}-^{19}\text{F}$ КССВ. Область применения и ограничения.	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
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	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 . Практические занятия (лабораторные работы) проводятся в здании ЦКП (НОЦ) РУДН под руководством сотрудников центра, которые оснащены ЯМР-спектрометрами Magritec “SpinSolve Carbon 43 MHz” и Jeol «JNM-ECA 600».
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. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР: Пер. с англ. М.: Мир, 1984.
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

<https://mega.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 «Знаниум» <https://znanium.ru/>

2. Базы данных и поисковые системы

- Sage <https://journals.sagepub.com/>

- Springer Nature Link <https://link.springer.com/>

- Wiley Journal Database <https://onlinelibrary.wiley.com/>

- Научометрическая база данных Lens.org <https://www.lens.org>

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

1. Курс лекций по дисциплине «Основы ЯМР».

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

РАЗРАБОТЧИК:

Профессор кафедры
органической химии

Должность, БУП

Подпись

Зубков Федор Иванович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой
органической химии

Должность БУП

Подпись

Воскресенский Леонид
Геннадьевич

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой общей и
неорганической химии

Должность, БУП

Подпись

Хрусталеv Виктор
Николаевич

Фамилия И.О.