

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

ЯМР ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Рекомендуется для направления подготовки

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

1. Цели и задачи дисциплины.

Целью курса «ЯМР органических соединений» 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 ^{13}C органических соединений.

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО.

Дисциплина «ЯМР органических соединений» относится к вариативной части блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 и является дисциплиной модуля 1 по выбору. Для успешного освоения дисциплины учащийся магистратуры обязан иметь базовые знания на уровне бакалавра.

Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь полные знания о строении вещества (строение молекул, атомов и атомного ядра), владеть основными представлениями о квантовой химии органических и неорганических соединений (квантовые числа, строение электронных оболочек, типы связей, электроотрицательность элементов). Обладать достаточным уровнем знаний по общим курсам неорганической, органической и физической химии.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД НИР Основы биотехнологии Молекулярный спектральный анализ Экспериментальные методы исследования в химии Домино реакции в синтезе гетероциклов Молекулярный спектральный анализ	Актуальные задачи современной химии Химия гетероциклических соединений Масс-спектрометрия органических соединений Стереохимия Основы дизайна ЛП Химия природный соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные	Актуальные задачи современной химии	Актуальные задачи современной химии

методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук	Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД НИР Основы биотехнологии Молекулярный спектральный анализ Экспериментальные методы исследования в химии Домино реакции в синтезе гетероциклов Молекулярный спектральный анализ	Химия гетероциклических соединений Масс-спектрометрия органических соединений Стереохимия Основы дизайна ЛП Химия природный соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
М-ПК-2-н Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Актуальные задачи современной химии Методы органической химии Теоретическая органическая химия Методика работы с БД НИР Основы биотехнологии Молекулярный спектральный анализ Экспериментальные методы исследования в химии Домино реакции в синтезе гетероциклов Молекулярный спектральный анализ	Актуальные задачи современной химии Химия гетероциклических соединений Масс-спектрометрия органических соединений Стереохимия Основы дизайна ЛП Химия природный соединений Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:
Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного

	исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)
--	---	--

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: основные термины и понятия ядерного магнитного резонанса, теоретические основы и экспериментальное оформление метода. Основные методики, применяющиеся на современных спектрометрах ЯМР. Возможности и ограничения метода для установления строения органических и неорганических молекул.

Уметь: обрабатывать и расшифровывать данные полученные на ЯМР-спектрометрах. Устанавливать строение несложных молекул, опираясь на данные ЯМР (в основном ЯМР ^1H и ^{13}C). Делать отнесения в спектрах ^1H и ^{13}C известных соединений, опираясь на табличные данные.

Владеть: основными приёмами расшифровки спектральных данных ЯМР.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **3** зачетных единиц.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		4			
Аудиторные занятия (всего)	48	48			
В том числе:					
Лекции	24	24			
Практические занятия (ПЗ)					
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	24	24			
Самостоятельная работа (всего)	60	60			
Общая трудоемкость	час	108	108		
	зач. ед.	3	3		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1	Введение и теоретические основы метода ЯМР	ЯМР спектроскопия и её место среди физических методов изучения процессов и продуктов органической химии. Элементы теории явления ЯМР. История развития метода (И. Раби, Ф. Блох, Э. Пёрселл). Спиновые числа и магнитный момент атомов, эффект Зеемана,

		Ларморовские частоты. Условия магнитного резонанса. Спад свободной индукции. Времена продольной и поперечной релаксации.
2	Строение ЯМР-спектрометра	Виды ЯМР-спектрометров. Принципиальная схема работы аппарата. Возможности. Описание метода проведения анализа, выходные данные, полученные после снятия спектра.
3	Параметры спектров ЯМР ^1H и ^{13}C	Применяющиеся растворители, внутренний и внешний стандарты. Параметры спектров ЯМР, их информативность. Ширина и интенсивность линии ЯМР. Интегрирование. Химический сдвиг. Химические сдвиги ядер ^1H и ^{13}C органических молекул. Понятие о тонкой структуре спектров ЯМР ^1H и ^{13}C , КССВ. Спин-спиновое взаимодействие.
4	Особенности ЯМР различных классов органических соединений	Характеристичные сигналы в протонных и углеродных спектрах алкенов, алкинов, аренов, карбоновых кислот и карбонильных соединений. Их использование для установления структуры.
5	Программа Триал	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.
6	Расшифровка ^1H спектров неизвестных соединений	Преобразование фидов ЯМР ^1H для дальнейшей работы со спектром: определение пространственного строения органических соединений по данным.
7	Расшифровка ^{13}C спектров неизвестных соединений	Преобразование фидов ЯМР ^1H для дальнейшей работы со спектром: определение пространственного строения органических соединений по данным ЯМР ^{13}C .
8	Расшифровка спектров неизвестных соединений по совокупности данных ЯМР	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.

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции	Практические занятия и лабораторные работы		СРС	Всего час.
			ПЗ/С	ЛР		
1	Введение и теоретические основы метода ЯМР	4		1	3	8
2	Строение ЯМР-спектрометра	2		1	4	7
3	Параметры спектров ЯМР ^1H и ^{13}C	2		1	6	8
4	Особенности ЯМР различных классов органических соединений	3		1	6	9
5	Программа Триал	3		3	10	17
6	Расшифровка ^1H спектров неизвестных соединений	3		5	10	19

7	Расшифровка ^{13}C спектров неизвестных соединений	3		6	10	19
8	Расшифровка спектров неизвестных соединений по совокупности данных ЯМР	4		6	11	21
	Всего	24		24	60	108

6. Лабораторный практикум

На лабораторном практикуме перед магистрами ставится задача в идентификации соединений, полученных ими в ходе научной деятельности (НИР) методом ^1H и ^{13}C ЯМР. Эксперимент производится на ЯМР-спектрометре Jeol «JNM-ECA 600» в здании ЦКП (НОЦ) РУДН под руководством сотрудников центра.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудо-емкость (час.)
1.	1,2	Ознакомление с работой прибора Jeol «JNM-ECA 600»	2
2.	3,4,5,6	Проведение ^1H ЯМР съемки исследуемого образца	10
3.	7	Проведение ^{13}C ЯМР съемки исследуемого образца	3
4.	7	Проведение ^{13}C ЯМР-DEPT-135 съемки исследуемого образца	4
5.	8	Расшифровка ^1H ЯМР спектра исследуемого образца	3
6.	8	Расшифровка ^{13}C ЯМР и ^{13}C ЯМР-DEPT-135 спектра исследуемого образца	3

7. Практические занятия (семинары) – не предусмотрены учебным планом.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

ул. Орджоникидзе, д.3, корп. 1

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы:

ауд.№ 612 Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор BENQ MX661, проектор NEC NP40, экран моторизованный для проекторов, столы; имеется wi-fi

Москва, ул. Орджоникидзе, 3, стр.6

Лаборатория спектральных методов исследования ЦКП ФХИ

Учебно-научная лаборатория для проведения занятий лабораторного типа, индивидуальных консультаций

ауд.№ 119 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?pages=5972>, а также ЦКП (НОЦ) РУДН: <http://ссп.rudn.ru/?pages=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».

9. Информационное обеспечение дисциплины

а) программное обеспечение

Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions № 86626883 (продлевается ежегодно, программе присваивается новый номер), ISIS Draw. Интернет поисковики FireFox и Opera.

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН
<http://lib.rudn.ru:8080/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>
 - Методические материалы на сайте ТУИС (рабочая программы курса, лекционные материалы, методическое обеспечение лабораторных занятий, материалы для подготовки к аттестационным испытаниям).

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

а) Основная литература:

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

б) 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.

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Условия и критерии выставления оценок: от студентов требуется посещение лекций и лабораторных занятий, обязательное участие в аттестационно-тестовых испытаниях, выполнение заданий преподавателя. Для оценки текущих контрольных работ и итогового контроля применяется балльно-рейтинговая система оценки знаний. Студентами в семестре выполняются 2 письменных контрольных работы.

Лекции:

Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации.

Подготовка к промежуточной аттестации

При подготовке к итоговому контролю необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу.

Методические указания и рекомендации по выполнению лабораторных работ.

При выполнении экспериментальной работы студент обязан:

- 1) Предварительно подробно ознакомиться с теоретическим материалом и хорошо понять химизм процессов, которые предстоит изучить на практике.
- 2) Внимательно прочитать в методическом руководстве порядок выполнения данного синтеза.
- 3) Выполнить эксперимент, соблюдая все меры предосторожности и проводя нужные наблюдения.
- 4) В качестве отчета о выполнении лабораторной работы необходимо предоставить распечатанные спектры с расшифровкой и соотнесением сигналов, с указанием мультиплетности и констант спин-спинового взаимодействия

Техника безопасности: соблюдение необходимых мер предосторожностей при работе со спектрометром ЯМР, выполнять все указания сотрудников ЦКП, не проводить никаких самостоятельных манипуляций без ведома сотрудников центра.

Правила выполнения письменных работ (контрольных тестовых работ).

Для проверки усвоения теоретических знаний и выполнения лабораторных работ, студенты выполняют письменные контрольные работы.

- Контрольные работы выполняются по пунктам в отдельной тетради, на обложке которой указаны название дисциплины, фамилия и инициалы, специальность, курс. Перед каждой контрольной работой указывается номер контрольной работы, вариант задания, дата.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «ЯМР органических соединений» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

доцент,
кафедры органической химии



Зубков Ф. И.

Руководитель программы
профессор,
кафедры органической химии



Варламов А. В.

Заведующий кафедрой
органической химии



Воскресенский Л. Г.