

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации

Аннотация рабочей программы дисциплины

Б1.В.17 Физические методы исследования строения органических соединений

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	Синтез и анализ органических соединений
Форма обучения:	очная

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенции, индикаторы и результаты обучения

ПК-1 Способен выполнять эксперименты с использованием современной аппаратуры и оформлять результаты исследований и разработок

ПК-1.1 Использует современную аппаратуру при проведении научных исследований с применением физико-химических методов анализа, в том числе анализа биологически активных веществ с целью установления их структуры/строения/свойств

Знать:

ПК-1.1/Зн1 Знать основные характеристики масс-, УФ-, ИК и ЯМР-спектров.

ПК-1.1/Зн2 Знать назначение и основные функции программного обеспечения для обработки спектральных и кристаллографических данных.

Уметь:

ПК-1.1/Ум1 Уметь пользоваться программным обеспечением для обработки масс-, УФ-, ИК- и ЯМР-спектров, данных РСА.

ПК-1.1/Ум2 Уметь составлять спектроскопическое описание вещества.

ПК-1.1/Ум3 Уметь выбирать и использовать высокотехнологическое оборудование для анализа сырья, исходных реагентов и конечной продукции.

Владеть:

ПК-1.1/Нв1 Владеть навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований с применением физико-химических методов анализа, в том числе анализа биологически активных веществ с целью установления их структуры/строения/свойств.

ПК-4 Способен осуществлять контроль качества лекарственных средств, исходного сырья, промежуточной продукции проводить паспортизацию продукции

ПК-4.3 Осуществляет регистрацию, обработку и интерпретацию результатов проведенных испытаний лекарственных средств, исходного сырья, промежуточной продукции, в том числе оформляет протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме

Знать:

ПК-4.3/Зн1 Знать физические основы методов установления состава и структуры органических веществ

ПК-4.3/Зн2 Знать диапазоны характеристичных частот в ЯМР ¹H и ¹³C, ИК-спектрах органических веществ, методы исследования оптически активных молекул, методы монокристалльного и порошкового РСА связь между строением вещества и аналитическими сигналами двумерных спектров ЯМР.

ПК-4.3/Зн3 Знает правила и ГОСТы оформления протоколов испытаний, паспортов химической продукции, отчетов о выполненной работе по заданной форме.

Уметь:

ПК-4.3/Ум1 Уметь расшифровывать масс-спектры, ИК-спектры, УФ-спектры, ЯМР ¹H и ¹³C органических соединений.

ПК-4.3/Ум2 Уметь устанавливать структуру сложных органических веществ, используя комплекс спектральных данных

ПК-4.3/Ум3 Уметь составить протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме.

Владеть:

ПК-4.3/Нв1 Владеть навыками регистрации, обработки и интерпретации результатов проведенных испытаний лекарственных средств, исходного сырья, промежуточной продукции, в том числе оформлять протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме.

Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.В.17 «Физические методы исследования строения органических соединений» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 7, 8.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.О.10 Аналитическая химия;

Б1.В.07 Биоорганическая химия;

Б1.В.ДВ.02.02 Идентификация функциональных групп органических соединений методом ИК спектроскопии;

Б1.О.13 Органическая химия;

Б2.О.02(Н) производственная практика (научно-исследовательская работа);

Б1.В.14 Химические основы биологических процессов;

Б1.В.ДВ.02.01 Химия синтетических биологически активных веществ;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.15 Биофармацевтические препараты;

Б1.В.ДВ.05.02 Биохимические методы;

Б1.О.20 Введение в фармакопейный анализ;

Б1.В.ДВ.04.02 Катализ в органическом синтезе;

Б1.В.ДВ.05.01 Надлежащая лабораторная практика;

Б3.01(Д) Подготовка к защите и защита выпускной квалификационной работы;

Б1.В.ДВ.03.02 Пробоподготовка в химическом анализе;

Б2.В.02(Пд) производственная практика (преддипломная практика);

Б1.В.ДВ.04.01 Современные методы очистки органических веществ;

Б1.В.ДВ.03.01 Электрохимические методы анализа;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

2. Содержание разделов, тем дисциплин

Раздел 1. Методы установления состава и структуры органических веществ.

Тема 1.1. Строение органических соединений: структура и конформация.

Понятия о строении, составе, структуре и конформации органического вещества. Структурная изомерия, диастереомерия и энантиомерия. Построение структурных и конформационных изомеров, определение относительной и абсолютной конфигурации.

Тема 1.2. Методы установления состава вещества.

Общая схема установления и исследования строения органических соединений, прямая и обратная задача. Систематизация методов исследования строения органических веществ.

Методы установления состава вещества. Элементный анализ: принцип метода, техника эксперимента. Современный элементный анализ. ГХ и РФА. Масс-спектрометрия: принцип метода, техника эксперимента. Методы ионизации. Масс-спектрометрия с ионизацией электронным ударом (ЭУ). Особенности фрагментации органических соединений. Масс-спектрометрия с ионизацией электроспреем (ESI). Методы детекции ионов. Масс-спектрометрия высокого разрешения (HRMS).

Установление связи между методами ионизации вещества и границами применимости данных методов. Анализ данных элементного анализа, расшифровка масс-спектров органических веществ. Установление состава вещества. Теститрование.

Тема 1.3. Электронная и колебательная спектроскопия.

Принцип спектроскопии. Диапазоны электромагнитного излучения и его влияние на структурные элементы молекулы. Электронная спектроскопия (УФвид): принцип метода, техника эксперимента, информация, получаемая о строении вещества. Колебательная спектроскопия (ИК и КР): принцип метода, техника эксперимента, области применения и ограничения метода, информация, получаемая о строении вещества, валентные и деформационные колебания. Установление связи между аналитическими сигналами УФ- и ИК-спектров и структурными элементами молекулы. Анализ и расшифровка УФ- и ИК-спектров. Рассмотрение достоинств и ограничений методов.

Раздел 2. Аналитические сигналы органических веществ в спектрах ЯМР.

Тема 2.1. Спектроскопия ЯМР. Общие сведения. Спектроскопия ЯМР ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P . Особенности и области применения.

Установление связи между аналитическими сигналами спектров ЯМР и структурными элементами молекулы. Рассмотрение характеристик ЯМР спектров: химического сдвига, КССВ, интегральной интенсивности.

Тема 2.2. Спектры ЯМР ациклических и алициклических углеводородов.

Анализ спектров ЯМР предельных и непредельных углеводородов и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.3. Спектры ЯМР ароматических углеводов.

Анализ спектров ЯМР аренов и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.4. Спектры ЯМР галогенсодержащих производных.

Анализ спектров ЯМР галогенопроизводных и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.5. Спектры ЯМР гидрокси- и меркаптопроизводных.

Анализ спектров ЯМР гидрокси- и меркаптопроизводных и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.6. Спектры ЯМР азотсодержащих производных.

Анализ спектров ЯМР amino- и нитросоединений и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.7. Спектры ЯМР карбонильных соединений и их производных.

Анализ спектров ЯМР карбонильных соединений и их производных и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.8. Спектры ЯМР карбоновых кислот и их производных.

Анализ спектров ЯМР карбоновых кислот и их производных и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.9. Спектры ЯМР гетероциклических соединений.

Анализ спектров ЯМР гетероциклических соединений и зависимостей химических сдвигов и КССВ от структуры вещества.

Тема 2.10. Установление структуры полифункциональных соединений.

Обсуждение, формулировка проблемы и решение кейс-задачи 1 "Установление структуры полифункциональных соединений".

Тема 2.11. Установление структуры соединений в смеси.

Анализ спектров ЯМР реакционных и других смесей органических соединений.

Тема 2.12. Курсовая работа «Установление и анализ структуры органических соединений».

Самостоятельное выполнение студентом теоретической работы по теме «Установление и анализ структуры органических соединений» (из списка) с последующей защитой работы в устной форме с использованием презентации.

Раздел 3. Методы анализа сложных органических молекул.

Тема 3.1. Двумерная спектроскопия ЯМР. Анализ двумерных спектров гомоядерных корреляций.

Двумерная спектроскопия ЯМР. Анализ двумерных спектров гомоядерных корреляций.

Тема 3.2. Спектры ЯМР гетероядерных корреляций (HSQC, HMQC, HMBC).

Расшифровка спектров ЯМР гетероядерных корреляций (HSQC, HMBC).

Тема 3.3. Спектры ЯМР с применением ядерного эффекта Оверхаузера (NOESY, ROESY).

Расшифровка спектров ЯМР с применением ЯОЭ (NOESY, ROESY). Использование двумерных спектров ЯМР для определения таутомерной формы и конформационного строения веществ.

Тема 3.4. Установление строения природных соединений на основании комплекса спектральных данных.

Установление строения природных соединений на основании комплекса спектральных данных.

Тема 3.5. Методы рентгеноструктурного анализа. Основы кристаллографии и кристаллохимии.

Основные понятия кристаллографии и кристаллохимии. Физические основы метода РСА, техника эксперимента. Рассмотрение и использование основных понятий кристаллохимии для получения рентгеновских дифрактограмм.

Тема 3.6. Порошковый и монокристалльный рентгеноструктурный анализ.

Монокристалльный и порошковый РСА. Изучение процесса выполнения РСА и анализ получаемых данных.

Тема 3.7. Методы исследования оптически активных веществ. Оптические методы.

Поляриметрия. Дисперсия оптического вращения. Спектроскопия кругового дихроизма. Определение абсолютной структуры вещества, применение РСА. Применение ЯМР для исследования оптически активных веществ, шифт-реагенты и хиральные растворители.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Период	доемкость сы)	доемкость ЭТ)	ая работа всего)	ии в период (часы)	ии в период обучения (часы)	ые часы иод обучения (часы)	т (часы)	ие занятия сы)	ьная работа а (часы)	ая атгестация сы)
--------	------------------	------------------	---------------------	-----------------------	--------------------------------	--------------------------------	----------	-------------------	-------------------------	----------------------

обучения	Общая гру (ча (ча	Общая гру (ЗІ (ЗІ	Контактн (часы, (часы,	Консультац сессии	Консультац теоретического	Контакты на аттестацию в пер	Лекции	Практическ (ча (ча	Самостоятел студент	Промежуточн (ча (ча
Седьмой семестр	216	6	124		32	6	32	54	92	Зачет Курсовая работа
Восьмой семестр	108	3	70	2	12		24	32	13	Экзамен (25)
Всего	324	9	194	2	44	6	56	86	105	25

Разработчик(и)

Кафедра органической химии, кандидат химических наук, доцент Чернов Н. М.