

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИШНПТ

 Яковлев А.Н.

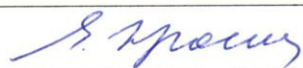
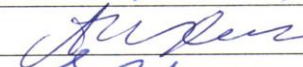

«30» 08 2020 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ПРИЕМ 2019 г.**  
**ФОРМА ОБУЧЕНИЯ очная**

**Физико-химические методы анализа биологически активных соединений**

Направление подготовки/ специальность	18.04.01 Химическая технология		
Образовательная программа (направленность (профиль))	Химия и технология биологически активных веществ		
Специализация	Химия и технология биологически активных веществ		
Уровень образования	высшее образование - магистратура		
Курс	1	семестр	2
Трудоемкость в кредитах (зачетных единицах)	3		
Виды учебной деятельности	Временной ресурс		
Контактная (аудиторная) работа, ч	Лекции	8	
	Практические занятия	16	
	Лабораторные занятия	24	
	ВСЕГО	48	
Самостоятельная работа, ч		60	
ИТОГО, ч		108	

Вид промежуточной аттестации	зачет	Обеспечивающее подразделение	НОЦ Н.М. Кижнера
---------------------------------	-------	---------------------------------	---------------------

Руководитель НОЦ Н.М. Кижнера		Краснокутская Е.А.	
Руководитель ООП		Хлебников А.И.	
Преподаватель		Краснокутская Е.А.	

2020 г.

## 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины является формирование у обучающихся определенного ООП (п. 5. Общей характеристики ООП) состава компетенций для подготовки к профессиональной деятельности.

Код компетенции	Наименование компетенции	Составляющие результатов освоения (дескрипторы компетенций)	
		Код	Наименование
ПК(У)-3	Способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты	ПК(У)-3.В1	Владеет физико-химическими методами исследования органических веществ
		ПК(У)-3.У1	Умеет выбрать метод исследования для заданной научной и технологической задачи, спланировать и провести экспериментальное исследование, провести интерпретацию результатов исследования
		ПК(У)-3.31	Знает современные физико-химические методы исследования органических веществ (теоретические основы методов, возможности и границы применимости)

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Дисциплина относится к вариативной части Блока 1 учебного плана образовательной программы.

## 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

После успешного освоения дисциплины будут сформированы результаты обучения:

Код	Планируемые результаты обучения по дисциплине	Компетенция
	Наименование	
РД-1	Применять знания теоретических основ методов ИК-, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии интерпретации спектральных данных	ПК(У)-3
РД-2	Уметь проводить поиск необходимой информации с использованием современных баз спектральных данных органических веществ	ПК(У)-3
РД -3	Выполнять обработку и анализ спектральных данных, полученных при исследовании молекулярной структуры органических молекул методами ИК-, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии.	ПК(У)-3

Оценочные мероприятия текущего контроля и промежуточной аттестации представлены в календарном рейтинг-плане дисциплины.

#### 4. Структура и содержание дисциплины

##### Основные виды учебной деятельности

Разделы дисциплины	Формируемый результат обучения по дисциплине	Виды учебной деятельности	Объем времени, ч.
<b>Раздел 1. Спектрометрические методы анализа молекулярной структуры биологически активных соединений</b>	РД-1, РД-2, РД-3	Лекции	<b>8</b>
		Практические занятия	<b>14</b>
		Лабораторные занятия	<b>20</b>
		Самостоятельная работа	<b>50</b>
<b>Раздел 2. Комплексные методы исследования структуры биологически активных соединений</b>	РД-1, РД-2, РД-3	Лекции	<b>0</b>
		Практические занятия	<b>2</b>
		Лабораторные занятия	<b>4</b>
		Самостоятельная работа	<b>10</b>

Содержание разделов дисциплины:

<b>Раздел 1. Спектрометрические методы анализа молекулярной структуры биологически активных соединений</b>
--

1.1. Введение. Обзор методов, используемых для исследования биологически активных веществ.

1.2. ИК-спектроскопия. Валентные и деформационные колебания. Подготовка образцов для снятия ИК-спектров. Важнейшие характеристические полосы поглощения в области основных частот колебаний органических молекул

2.3. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Основные характеристики спектров ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ . Химический сдвиг. Факторы, влияющие на химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Интегральная интенсивность сигнала ПМР.

2.4. Масс-спектрометрия. Основные правила и подходы к интерпретации масс-спектров.

##### Темы лекций:

1. Электромагнитный спектр. Основы метода ИК-спектроскопии
2. Основы метода Ядерного магнитного резонанса
3. Основы метода Ядерного магнитного резонанса
4. Основы метода масс-спектрометрии

##### Темы практических занятий:

1. Вводное. Техника безопасности
2. Интерпретация ИК-спектров
3. Интерпретация спектров ЯМР $^1\text{H}$
4. Интерпретация спектров ЯМР $^{13}\text{C}$
5. Интерпретация масс-спектров.

##### Названия лабораторных работ:

1. Работа с современными базами спектральных характеристик органических веществ. Работа с программой Chem Draw.
2. Работа с программой Hypercube HyperChem 8.0.10. Оптимизация геометрии молекулы. Расчет ИК-спектров с использованием Hypercube HyperChem 8.0.10.
3. Коллоквиум «Важнейшие характеристические полосы поглощения в области основных частот колебаний органических молекул».
4. Расчет спектров ЯМР  $^1\text{H}$ , ЯМР  $^{13}\text{C}$  с использованием программы Chem Draw.
5. Коллоквиум Масс-спектры отдельных классов органических веществ.

## **Раздел 2. Комплексные методы исследования структуры биологически активных соединений**

2.1. Область использования методов ГХ-МС, ВЭЖХ-МС. Проведение количественного и структурного анализа методами ГХ-МС, ВЭЖХ-МС.

### **Темы практических занятий:**

6. Возможности методов ГХ-МС, ВЭЖХ-МС для количественного и структурного анализа

### **Названия лабораторных работ:**

6. Проведение количественного и структурного анализа биологически активного соединения методом ГХ-МС.
7. Интерпретация данных результатов анализа, полученных с использованием комплексных методов ГХ-МС, ВЭЖХ-МС.

## **5. Организация самостоятельной работы студентов**

Самостоятельная работа студентов при изучении дисциплины (модуля) предусмотрена в следующих видах и формах:

- Работа с лекционным материалом, поиск и обзор литературы и электронных источников информации по индивидуально заданной проблеме курса;
- Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку;
- Поиск, анализ, структурирование и презентация информации;
- Перевод текстов с иностранных языков;
- Выполнение домашних заданий
- Подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям;
- Подготовка к оценивающим мероприятиям.

## **6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **6.1. Учебно-методическое обеспечение**

1. Сильверстейн, Роберт. Спектрометрическая идентификация органических соединений: пер. с англ. / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл : пер. с англ. / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. — Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 558 с.: ил.. — Методы в химии. — Библиогр. в конце глав. — Предм. указ.: с. 546-549.. — ISBN 978-5-94774-392-0.

Схема доступа:

<http://catalog.lib.tpu.ru/catalogue/simple/document/RU%5CTPU%5Cbook%5C215459>.

2. Краснокутская, Е. А. Спектральные методы исследования в органической химии : учебное пособие / Е. А. Краснокутская, В. Д. Филимонов. — Томск : ТПУ, [б. г.]. — Часть II : ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия — 2013. — 88 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/45172> (дата обращения: 23.02.2019). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

### **Дополнительная литература**

1. Гордон, А. Дж.. Спутник химика : физико-химические свойства, методики, библиография : пер. с англ. / А. Дж. Гордон, Р. А. Форд. — Москва: Мир, 1976. — 541 с.: ил.. — Библиогр. в конце глав..

### **6.2. Информационное и программное обеспечение**

Internet-ресурсы (в т.ч. в среде LMS MOODLE и др. образовательные и библиотечные ресурсы):

1. Образовательный портал, где освещены теоретические и прикладные аспекты основных физико-химических методов исследования <http://www.orgchemlab.com>
2. Поисковая база спектральных данных органических веществ: <http://riodb01.ibase.aist.go.jp>; <http://www.sigmaaldrich.com>;
3. Учебные пособия, размещенные на персональном сайте преподавателя <http://portal.tpu.ru:7777/SHARED/e/EAK>,
4. Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы доступны по ссылке: <https://www.lib.tpu.ru/html/irs-and-pdb>

Лицензионное программное обеспечение (в соответствии с **Перечнем лицензионного программного обеспечения ТПУ**):

1. 7-Zip;
2. Document Foundation LibreOffice;
3. Adobe Acrobat Reader DC;
4. Adobe Flash Player; AkelPad;
5. Cisco Webex Meetings;
6. Design Science MathType 6.9 Lite;
7. Google Chrome;
8. Mozilla Firefox ESR;
9. Tracker Software PDF-XChange Viewer;
10. WinDjView; Zoom Zoom;
11. Hypercube HyperChem 8.0.10;
12. Cambridgesoft ChemBio Office 14.

## 7. Особые требования к материально-техническому обеспечению дисциплины

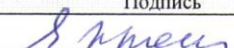
В учебном процессе используется следующее лабораторное оборудование для практических и лабораторных занятий:

№	Наименование специальных помещений	Наименование оборудования
1.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 301	Комплект учебной мебели на 110 посадочных мест; Компьютер - 1 шт.; Проектор - 1 шт.
2.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 307А	Комплект учебной мебели на 20 посадочных мест; Интерактивная доска IQBoard ET-D AD080 - 1 шт.; Компьютер - 1 шт.; Проектор - 1 шт.
3.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (компьютерный класс) 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 310	Комплект учебной мебели на 11 посадочных мест; Компьютер - 10 шт.; Принтер - 3 шт.
4.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов,	Аудитория для самостоятельной работы. Шкаф общелабораторный - 1 шт.;

	курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (научная лаборатория) 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 308	ИК-Фурье спектрометр Cary 630 - 1 шт.; Газовый хроматограф «Маэстро» - 1 шт.; Хромато-масс-спектрометрическая система (ГХ/МС) на базе Agilent 7890 - 1 шт. с обслуживающим компьютером – 1 шт., обслуживающим принтером – 1 шт.;
5.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (научная лаборатория) 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 312	Аудитория для самостоятельной работы. Комплект учебной мебели на 5 посадочных мест; Тумба подкатная - 3 шт.; Компьютер -5 шт.; Принтер - 2 шт. Поляриметр CM-3 - 1 шт.; pH-метр/иономер S220-Kit - 1 шт.; Центрифуга MiniSpin plus Eppendorf с ротором - 1 шт.; Облучатель на длину волны 254 и 365 нм - 1 шт.; Весы аналитические HTR-120CE Shinko - 1 шт.; Хроматоскоп Spectrolin E-Series UV Lamp - 1 шт.; Магнитная мешалка C-MAG HS 7 IKAMAG - 1 шт.; Насос мембранный PVR Micro M71S AS - 1 шт.; Устройство д/сушки посуды ПЭ-2000 - 1 шт.; PH-410 стандартный - 1 шт.; Столик "Бютиуса" - 1 шт.; Аналитическая хиральная колонка ULTRON ES-Pepsin Chiral 4.6x150mm.5u - 1 шт.; Плитка нагревательная HP-20D-Unit - 1 шт.; Мешалка магнитная с подогревом (тип 1) MSH-20A - 3 шт.; Шкаф с принудительной конвекцией FD 53 - 1 шт.; Весы лабораторные WPS 510/C/2 - 1 шт.; Шкаф сушильный LOIP LF-25/350-VS2 - 1 шт.; Мешалка магнитная с подогревом MSH-300 - 1 шт.; Автоматический поляриметр POL-1/2 - 1 шт.; Микроскоп стерео MC-1 вап.2C Didital - 1 шт.; Анализатор лекарственных средств и их метаболитов на базе ВЭЖХ 1200 - 1 шт. с обслуживающим компьютером – 1 шт., с обслуживающим принтером – 1 шт.; Комплект учебно-научного оборудования - 1 шт.; Ротационный испаритель ROTOVAPOR R215/V - 1 шт.


Рабочая программа составлена на основе Общей характеристики образовательной программы по направлению 18.04.01 Химическая технология, профиль Химия и технология биологически активных веществ (приема 2019 г., очная форма обучения).

Разработчик(и):

Должность	Подпись	ФИО
Доцент		Краснокутская Е.А.

Программа одобрена на заседании НОЦ Н.М. Кижнера (протокол от 26.06.2019 г. № 4).

Руководитель выпускающего  
НОЦ Н.М. Кижнера,  
д.х.н., доцент

 /Краснокутская Е.А./  
подпись

**Лист изменений рабочей программы дисциплины:**

Учебный год	Содержание /изменение	Обсуждено на заседании НОЦ Н.М. Кижнера (протокол)
2020/2021 учебный год	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Изменена форма рабочей программы в соответствии с приказом ТПУ от 06.05.2020 г. № 127-7/об «Об утверждении форм документов ООП»</li><li>2. Обновлено программное обеспечение</li><li>3. Обновлен состав профессиональных баз данных и информационно-справочных систем</li></ol>	от 25.06.2020 г. № 4