

**2023/2024. TANÉVBEN ÉRVÉNYES  
TANTÁRGYI PROGRAM**

**Tantárgy teljes neve: MOLEKULASZERKEZET-MEGHATÁROZÁS SPEKTROSZKÓPIAI MÓDSZEREKKEL**

**Képzés:** egységes osztatlan képzés (gyógyszerész)

**Munkarend:** nappali

**Tantárgy rövidített neve:** Molspektrum

**Tantárgy angol neve:** Structure elucidation by spectroscopic methods

**Tantárgy német neve:** Molekülstrukturaufklärung mit spektroskopischen Methoden

**Tantárgy besorolása:** kötelező/szabadon választható/kritériumkövetelmény

**Tantárgy neptun kódja:** GYSGYK206E1M

**A tantárgy oktatásáért felelős szervezeti egység:** GYTK Gyógyszerészi Kémiai Intézet

**A tantárgyfelelős neve:**

**Dr. Horváth Péter**

**Elérhetőség:**

horvath.peter@semmelweis.hu

**Beosztás, tudományos fokozat:**

egyetemi docens, PhD.

**A tantárgy oktatásában résztvevő(k) neve(i):**

Horváth Péter

Mazákné Krasznai Márta

Mirzahosseini Arash

Tóth Gergő

Horváth Dániel

**Beosztás, tudományos fokozat:**

egyetemi docens, PhD

egyetemi docens PhD

egyetemi adjunktus PhD

egyetemi adjunktus PhD

tudományos segédmunkatárs, PhD.

**A tantárgy heti óraszám:**

**3** óra elmélet

**0** óra gyakorlat

**A tantárgy kreditpontja:**

**3** kredit

**A tantárgy szakmai tartalma elsajátításának célja és feladata a képzés céljának megvalósításában:**

Modern nagyműszeres analitikai eljárások elméleti hátterének és gyakorlati alkalmazásának bemutatása szerves molekulák szerkezet-felderítésében. A tárgy a Műszeres Gyógyszeranalízis tárgy során megszerzett elméleti és gyakorlati ismeretek magasabb szintre emelésével a műszeres analitika iránt érdeklődő hallgatók számára nyújt kibővített ismereteket

**A tantárgy rövid leírása:**

A korszerű, nagyteljesítőképességű, nagyműszeres analitikai technikák fizikai hátterének ismertetése. Az UV/VIS, IR, CD/ORD, tömegspektrometria segítségével nyerhető szerkezeti információk értelmezése. Az NMR spektroszkópia részletes tárgyalása az alapjelenségektől a többdimenziós technikákig. A módszerek információtartamának együttes értelmezése.

**Az adott félévi kurzusra vonatkozó adatok**

Tárgyfelvétel féléve	Kontakt elméleti óra	Kontakt gyakorlati óra	Kontakt demonstrációs gyakorlati óra (szeminárium)	Egyéni óra	Össz. óra	Meghirdetés gyakorisága	Konzultációk száma
6. félévtől	39	--	3	--	42	Őszi szemeszterben* <b>Tavaszi szemeszterben*</b> Mindkét szemeszterben* (* Megfelelő aláhúzendő)	--

## **A kurzus oktatásának időterve\*\***

### **Elméleti órák tematikája (heti bontásban):**

1.) Szerves vegyületek kvalitatív és kvantitatív analitikája  
2.) Elektronspektroszkópiai módszerek UV, ORD és CD spektroszkópia  
3.) Raman és Infravörös spektroszkópia  
4.) Tömegspektroszkópia  
5-13 hét: Magspin, ill. viselkedése mágneses térben,  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR spektroszkópia, A pulzus Fourier transzformációs mérési technika (PFT), spektrumakkumuláció. Az alapvető NMR paraméterek : relaxáció, kémiai eltolódás és a spin-spin csatolódás elméleti alapjai, hatásuk a spektrumra és összefüggésük a kémiai szerkezettel. A kémiai eltolódást befolyásoló tényezők, szubsztituens effektusok, a kémiai eltolódások közelítő, empirikus számítása. A csatolási állandók felhasználása a dihedrális szög meghatározására (Karplus összefüggés), konformációs analízis, multiplicitási szabályok. Kettősrezonancia ill. spinlecsatolás, nukleáris Overhauser effektus és alkalmazása a proton és szén NMR spektroszkópiában. Speciális módszerek, dinamikus folyamatok, hőmérsékletfüggő mérések, spektrum szerkesztés, SPI effektus, két dimenziós módszerek: kémiai eltolódás korreláció (COSY), csatolás felbontott spektrumtérkép.  
NMR, MS és CD mérések – modellvegyület demonstrációs mérése, a spektrumok értékelés, szerkezet meghatározása. Konkrét példák bemutatása és a megoldási folyamat gyakorlása.  
Peptidek, fehérjék szerkezetvizsgálata  
14. hét: Önálló feladat. (sikeres teljesítése esetén megajánlott kollokviumi jegy kapható)

### **Gyakorlati órák és tematikája:**

NMR, MS és CD mérések – modellvegyület demonstrációs mérése, a spektrumok értékelés, szerkezet meghatározása. Konkrét példák bemutatása és a megoldási folyamat gyakorlása.  
Az elméletben megismert NMR technikák alapján NMR spektrumok közös feldolgozása, értelmezése, gyakorlás. Egyéni feladatok megoldása.

### **Az adott tantárgy határterületi kérdéseit érintő egyéb tárgyak (kötelező és választható tantárgyak is). A tematikák lehetséges átfedései:**

Műszeres Gyógyszeranalízis

**Konzultációk rendje:** Igény szerint

## **Kurzus követelményrendszere**

### **A kurzus felvételének előzetes követelménye(i):**

Gyógyszerkémia és analízis I.

### **A foglalkozásokon való részvétel követelményei, az elfogadható hiányzások mértéke, a távolmaradás igazolásának módja, pótlás lehetősége:**

TVSZ alapján

### **Az érdemjegy kialakításának módja, a félévközi részteljesítmény-értékelések (beszámolók, zárthelyi dolgozatok) formája, száma, témakörei és időpontjai, értékelésbe beszámításuk módja, pótlási és javítási lehetőségek (TVSZ. 25.-28.§-ban foglaltak szerint):**

Az előadáson mutatott aktivitás, az egyéni feladatok jó megoldása és az utolsó órai egyéni feladat helyes megoldása alapján megajánlott kollokviumi jegy kapható.

### **A félév végi aláírás feltételei (TVSZ. 29.§-ban foglaltak szerint):**

Az előadásokon való részvétel.

### **A hallgató félév során egyéni munkával megoldandó feladatainak száma és típusa, ezek leadási határideje:**

<p><b>A félév végi számonkérés típusa:</b> aláírás/gyakorlati jegy/<b>kollokvium</b>/szigorlat/projektfeladat*</p> <p style="text-align: right;">* Megfelelő aláhúzendó</p> <p><b>Vizsgakövetelmények</b> (tételsor, tesztvizsga témakörei, kötelezően elvárt paraméterek, ábrák, fogalmak, számítások listája, gyakorlati készségek, ill. a vizsgaként elismert projektfeladatok témakörei, teljesítésének és értékelésének kritériumai):</p>
<p><b>A félév végi számonkérés formája:</b> <u>írásbeli</u>/szóbeli/<b>gyakorlati feladat teljesítése/projektfeladat teljesítése/kombinált vizsga (TVSZ. 30.§ szerint)*</b></p> <p>* Megfelelő aláhúzendó</p>
<p><b>A jegymegajánlás lehetősége és feltételei:</b></p> <p>Az utolsó órán elvégzendő egyéni feladat alapján jó (75-87%) vagy jeles (87,5-&gt;) eredmény</p>
<p><b>A tananyag elsajátításához, a tanulmányi teljesítmény értékelések teljesítéséhez szükséges ismeretek megszerzéséhez felhasználható alapvető jegyzetek, tankönyvek, segédletek és szakirodalom listáját, pontosan kijelölve, mely részük ismerete, melyik követelmény elsajátításához szükséges (pl. tételenkénti bontásban), valamint a felhasználható fontosabb technikai és egyéb segédeszközök, tanulmányi segédanyagok:</b></p> <p>Dr. Tóth Gábor - Dr. Balázs Barbara: Szerves szerkezetfelderítés, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2005, jegyzetazonosító: 65037.</p> <p>H. Duddeck, W. Dietrich, <u>G. Tóth</u>: Structure Elucidation by Modern NMR. A Workbook, Springer-Steinkopff, Darmstadt (1998)</p> <p>Az előadásokhoz kapcsolódó segédanyagok letölthetőek a Moodle rendszerből</p> <p><b>Eszköz igény:</b> projektor, laptopok, MestreNova /Lite/ szoftver /biztosítjuk a hallgatók számára/</p>
<p><b>Több féléves tantárgy esetén a párhuzamos felvétel lehetőségére, valamint az engedélyezés feltételeire vonatkozó oktatási-kutatási szervezeti egység álláspontja:</b></p> <p>igen*/nem*/egyéni elbírálás alapján* (* Megfelelő aláhúzendó)</p>
<p><b>A tantárgyleírást készítette:</b> Horváth Péter</p>

**\*\* A tantárgy tematikáját oly módon kell meghatározni, hogy az lehetővé tegye más intézményben a kreditismerési döntéshozatalt, tartalmazza a megszerzendő ismeretek, elsajátítandó alkalmazási (rész)készségek, (rész)kompetenciák és attitűdök leírását, reflektálva a szak képzési és kimeneti követelményeire.**