

**2022/2023 TANÉVBEN ÉRVÉNYES
TANTÁRGYI PROGRAM**

Tantárgy teljes neve: MOLEKULASZERKEZET-MEGHATÁROZÁS SPEKTROSZKÓPIAI MÓDSZEREKKEL

Képzés: egységes osztatlan képzés (gyógyszerész)

Munkarend: nappali

Tantárgy rövidített neve: Molspektro

Tantárgy angol neve: Structure elucidation by spectroscopic methods

Tantárgy német neve: Molekülstrukturaufklärung mit spektroskopischen Methoden

Tantárgy neptun kódja: GYSGYK206E1M

Tantárgy besorolása: kötelező/szabadon választható/kritériumkövetelmény

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

A tantárgyfelelős neve:

Dr. Horváth Péter

Elérhetőség:

Cím: Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet, 1092. Budapest, Högyes Endre u. 9.

telefon: 06-1-217-0891

e-mail: horvath.peter@pharma.semmelweis-univ.hu

Beosztás, tudományos fokozat:
igazgató, egyetemi docens, Ph.D.

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

Dr. Horváth Péter

Dr. Mazákné Krasznai Márta

Dr. Mirzahosseini Arash

Dr. Tóth Gergő

Beosztás, tudományos fokozat:
egyetemi docens, igazgató, Ph.D.
egyetemi docens, Ph.D.
egyetemi adjunktus, Ph.D.
egyetemi adjunktus, Ph.D.

A tantárgy heti óraszám:

3 óra elmélet

A tantárgy kreditpontja:

3 kredit

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

Modern műszeres analitikai eljárások elméleti hátterének és gyakorlati alkalmazásának bemutatása szerves molekulák szerkezet-felderítésében

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.

Az adott félévi kurzusra vonatkozó adatok

Tárgyfelvétel ajánlott féléve	Kontakt elméleti óra	Kontakt gyakorlati óra	Kontakt demonstráció s gyakorlati óra	Egyéni óra	Összes óra	Meghirdetés gyakorisága	Konzultációk száma
6. félévtől	39	--	3	--	42	Őszi szemeszterben* Tavaszi szemeszter* Minkét szemeszterben* (* Megfelelő aláhúzendő)	--

*A kurzus oktatásának időterve***Elméleti órák tematikája (heti bontásban):**

1.) Szerves vegyületek kvalitatív és kvantitatív analitikája

2.) UV spektroszkópia

3.) Kiroptikai spektroszkópia

4.) Infravörös spektroszkópia

5.) Tömegspektroszkópia I.

6.) Tömegspektroszkópia II.

7-11. és 13. hét: Magspin, ill. viselkedése mágneses térben, ^1H és ^{13}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.

12.) NMR, MS és CD mérések – modellvegyület demonstrációs mérése, a spektrumok értékelés, szerkezet meghatározása

14.) Konkrét példák bemutatása és a megoldási folyamat gyakorlása

Gyakorlati órák tematikája: A 12. héten demonstrációs gyakorlat a szerkezetvizsgáló műszeres technikák alkalmazásával
Konzultációk rendje: -
<p style="text-align: center;"><i>Kurzus követelményrendszere</i></p>
A kurzus felvételének előzetes követelményei: Analitikai kémia (kvantitatív)/ Analitikai kémia II. Szerves kémia II. Fizikai kémia I./Fizikai kémia gyógyszerészeknek
A foglalkozásokon való részvétel követelményei, az elfogadható hiányzások mértéke, a távolmaradás igazolásának módja, pótlás lehetősége: Az Egyetem Szervezeti és Működési Szabályzatának részeként elfogadott Kreditrendszerű Tanulmányi és Vizsgaszabályzat rendelkezései alapján
Évközi ellenőrzések (beszámolók, zárthelyi dolgozatok) száma, témakörei és időpontjai, pótlási és javítási lehetőségek: -
A félév végi aláírás követelményei: Az előadások látogatása. (A hiányzás mértéke a TVSZ 17§ 7. pontja szerint)
A hallgató félév során egyéni munkával megoldandó feladatainak száma és típusa, ezek leadási határideje: Mintavegyület spektrális adatainak ismeretében a szerkezet igazolása
A félév végi számonkérés típusa: aláírás/gyakorlati jegy/ <u>kollokvium</u> /szigorlat
A félév végi számonkérés formája: írásbeli dolgozat
A tárgy előírt külső szakmai gyakorlatai: -
A tananyag elsajátításához felhasználható jegyzetek, tankönyvek, segédletek és szakirodalom listája: Dr. Tóth Gábor - Dr. Balázs Barbara: Szerves szerkezetfelderítés, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2005, jegyzetazonosító: 65037. H. Duddeck, W. Dietrich, <u>G. Tóth</u> : Structure Elucidation by Modern NMR. A Workbook, Springer-Steinkopff, Darmstadt (1998) Az előadásokhoz kapcsolódó segédanyagok letölthetőek az Intézet honlapjáról: http://semmelweis.hu/gyogyszereszi-kemia/oktatas/valaszthato-targyak/molekulaspektroszkopia/
A kurzus tárgyi szükségletei: projektor
A tantárgyleírást készítette: Dr. Horváth Péter egyetemi docens