

2024/2025. 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 besorolása: kötelező/ <u>szabadon választható</u> /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): Dr. Horváth Péter Dr. Mazákné Krasznai Márta Dr. Mirzahosseini Arash Dr. Tóth Gergő				Beosztás, tudományos fokozat: egyetemi docens, PhD egyetemi docens PhD egyetemi adjunktus PhD egyetemi docens 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* Tavaszi szemeszterben* Mindkét szemeszterben* (* Megfelelő aláhúzendő)	--

A kurzus oktatásának időterve**
<p>Elméleti órák tematikája (heti bontásban):</p> <p>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, ^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. 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)</p>
<p>Gyakorlati órák és tematikája:</p> <p>NMR, MS és CD mérések – modellvegyület demonstrációs mérése, a spektrumok értékelés, szerkezet meghatározása. Konkrét példák bemutatása és a megoldási folyamat gyakorlása.</p> <p>Az elméletben megismert NMR technikák alapján NMR spektrumok közös feldolgozása, értelmezése, gyakorlás. Egyéni feladatok megoldása.</p>
<p>Az adott tantárgy határterületi kérdéseit érintő egyéb tárgyak (kötelező és választható tantárgyak is). A tematikák lehetséges átfedései:</p> <p>Műszeres Gyógyszeranalízis</p>
<p>Konzultációk rendje: Igény szerint</p>
Kurzus követelményrendszere
<p>A kurzus felvételének előzetes követelménye(i):</p> <p>Gyógyszerkémia és analízis I.</p>
<p>A foglalkozásokon való részvétel követelményei, az elfogadható hiányzások mértéke, a távolmaradás igazolásának módja, pótlás lehetősége:</p> <p>TVSZ alapján</p>
<p>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):</p> <p>Az előadáson mutatott aktivitás, az egyéni feladatok jó megoldása és az utolsó órai egyéni feladat helyes megoldása alapján megajánlott kollokviumi jegy kapható.</p>
<p>A félév végi aláírás feltételei (TVSZ. 29.§-ban foglaltak szerint):</p> <p>Az előadásokon való részvétel.</p>
<p>A hallgató félév során egyéni munkával megoldandó feladatainak száma és típusa, ezek leadási határideje:</p>

<p>A félév végi számonkérés típusa: aláírás/gyakorlati jegy/<u>kollokvium</u>/szigorlat/projektfeladat*</p> <p style="text-align: right;">* Megfelelő aláhúzendó</p> <p>Vizsgakövetelmények (tételsor, tesztvizsga témakörei, kötelezően elvárt paraméterek, ábrák, fogalmak, számítások listája, gyakorlati készségek, ill. a vizsgaként elismert projektfeladatok témakörei, teljesítésének és értékelésének kritériumai): Az írásbeli vizsga két feladatból áll. Az első rész egyszerű választásos teszt feladat az ismertett módszerek elvi alapjainak tárgyköréből, a második feladat különböző analitikai módszerekkel kapott adatokból szerkezet meghatározás. (IR, UV, MS, NMR)</p>
<p>A félév végi számonkérés formája: <u>írásbeli/szóbeli/gyakorlati feladat teljesítése/projektfeladat teljesítése/kombinált vizsga (TVSZ. 30.§ szerint)</u>*</p> <p>* Megfelelő aláhúzendó</p>
<p>A jegymegajánlás lehetősége és feltételei: Az utolsó órán elvégzendő egyéni feladat alapján jó (75-87%) vagy jeles (87,5->) eredmény</p>
<p>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: 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 letölthetők a Moodle rendszerből</p> <p>Eszköz igény: projektor, laptopok, MestreNova /Lite/ szoftver /biztosítjuk a hallgatók számára/</p>
<p>Több féléves tantárgy esetén a párhuzamos felvétel lehetőségére, valamint az engedélyezés feltételeire vonatkozó oktatási-kutatói szervezeti egység álláspontja: igen*/nem*/egyéni elbírálás alapján* (* Megfelelő aláhúzendó)</p>
<p>A tantárgyleírást készítette: Dr. 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.**