

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского  
Уральского отделения Российской академии наук  
(ИОС УрО РАН)

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

элемента ООП подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

### **ТЕОРИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВА В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ХИМИИ, В ФАРМАКОГНОЗИИ**

Направление подготовки

**33.06.01 Фармация**

Направленность

**Фармацевтическая химия. Фармакогнозия**

Квалификация:

**Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения:

**Очная, заочная**

Раздел ООП:

**Блок 1. Дисциплины (модули). Вариативная часть**

Программа дисциплины составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта к основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 33.06.01 Фармация, утвержденного приказом Минобрнауки России от 03.09.2014 № 1201, с учетом приказа Минобрнауки России от 30.04.2015 № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень кадров высшей квалификации)».

Автор-разработчик:

Пестов А.В., к.х.н., доцент, старший научный сотрудник ИОС УрО РАН

## **АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ**

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом.

Дисциплина «Теория методов исследования вещества в химии» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» основной образовательной программы (*далее – ООП*) аспирантуры и является обязательной для освоения.

Рабочая программа соответствует:

- паспорту научной специальности 14.04.02 Фармацевтическая химия. Фармакогнозия (направленность Фармацевтическая химия. Фармакогнозия);
- учебному плану ООП по направлению 33.06.01 Фармация.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе (1 семестр) обучения в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е. (108 час.), в том числе, аудиторная работа представлена лекционными, практическими и лабораторными занятиями.

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных знаний о современных методах спектрального анализа и квантово-химических расчетов при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований.

Задачи дисциплины – обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний и практических навыков для анализа спектральных данных и проведения квантово-химических расчетов, умения использовать их результаты для понимания строения и свойств молекул.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках девяти разделов:

- Основные постулаты квантовой механики;
- Квантово-химические расчеты;
- Электронное строение атома;
- Электронное строение молекул;
- Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом;
- Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени;
- Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени;
- ИК-спектроскопия;
- Спектроскопия ЯМР.

Виды контроля:

- текущий – в рамках собеседования по итогам выполнения лабораторных работ;
- промежуточный – зачет (1 семестр);
- итоговый – в рамках государственного экзамена.

## 1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Цель изучения дисциплины** - формирование у аспирантов системы углубленных знаний о современных методах спектрального анализа и квантово-химических расчетов при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований.

**Задачи дисциплины** – обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний и практических навыков для анализа спектральных данных и проведения квантово-химических расчетов, умения использовать их результаты для понимания строения и свойств молекул.

## 2 ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 2.1 Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность и готовность к проведению научных исследований в области обращения лекарственных средств (ОПК-2);
- способность и готовность к использованию лабораторной и инструментальной базы для получения научных данных (ОПК-5);
- способность к самостоятельной организации НИР и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям по направленности (специальности) обучения (ПК-1);
- способность и готовность к научным исследованиям в области контроля качества, валидации и стандартизации лекарственных средств с использованием современных физико-химических методов анализа в соответствии с международными стандартами (ПК-2).

### 2.2. Требования к результатам освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен

*знать:*

- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач
- современные способы использования информационно-коммуникационных технологий (ИКТ) в выбранной сфере деятельности
- современное состояние науки в области фармацевтической химии, фармакогнозии;
- современный уровень лабораторной и инструментальной базы, используемой для получения научных данных
- современные физико-химические методы анализа, используемые для контроля качества и стандартизации лекарственных средств;

*уметь:*

- анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов
- выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
- выбирать и применять в профессиональной деятельности физико-химические методы анализа;

*владеть:*

- навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач
- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов
- методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (специальности) подготовки.

### 2.3 Связь с последующими элементами ООП

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении дисциплины «Теория методов исследования вещества в фармацевтической химии, фармакогнозии», необходимы для выполнения аспирантами элементов ООП Блока 3 «Научные исследования»: научно-исследовательская деятельность и подготовка научно-квалификационной работы.

## 3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 3.1 Виды учебной работы и контроля освоения дисциплины (очная форма обучения)

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.		
	Всего	По учебным семестрам	
		1	5
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>72/2.0</b>	<b>72/2.0</b>	
Лекции	18/0.5	18/0.5	
Практические занятия	18/0.5	18/0.5	
Лабораторные занятия	36/1.0	36/1.0	
<b>Самостоятельная работа студентов -</b> Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	<b>36/1.0</b>	<b>36/1.0</b>	
<b>Вид контроля:</b>	-	-	
текущий	-	-	
промежуточный	-	<b>Зачет</b>	
итоговый	-	-	<b>ГИЭ</b>
<b>Общая трудоемкость по учебному плану</b>	<b>108/3.0</b>	<b>108/3.0</b>	

### 3.2 Виды учебной работы и контроля освоения дисциплины (заочная форма обучения)

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.		
	Всего	По учебным семестрам	
		1	7
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>8/0.24</b>	<b>8/0.24</b>	
Лекции	2/0.06	2/0.06	
Практические занятия	2/0.06	2/0.06	
Лабораторные занятия	4/0.12	4/0.12	

<b>Самостоятельная работа студентов</b>	<b>100/2.76</b>	<b>100/2.76</b>	
<b>Вид контроля:</b>	-	-	
промежуточный	-	<b>Зачет</b>	
итоговый	-	-	<b>ГИЭ</b>
<b>Общая трудоемкость по учебному плану</b>	<b>108/3.0</b>	<b>108/3.0</b>	

### 3.3 Разделы дисциплины и виды занятий (очная форма обучения)

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем, час / з.е.				
		Всего	лекции	практические занятия	лабораторные работы	самостоятельная работа
1	Основные постулаты квантовой механики	5/0.14	4/0.111	-	-	1/0.028
2	Квантово-химические расчеты	35/0.97	3/0.083	6/0.167	14/0.385	14/0.385
3	Электронное строение атома	2/0.06	1/0.028	-	-	1/0.028
4	Электронное строение молекул	2/0.06	1/0.028	-	-	1/0.028
5	Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом	2/0.06	1/0.028	-	-	1/0.028
6	Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	14/0.385	2/0.056	2/0.056	6/0.165	4/0.111
7	Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	14/0,385	2/0.056	4/0.111	4/0.111	4/0.111
8	ИК-спектроскопия	16/0.44	4/0.111	2/0.056	6/0.167	4/0.111
9	Спектроскопия ЯМР	18/0,5	2/0.056	4/0.111	6/0.167	6/0.167
	<i>Итого:</i>	108/3.0	18/0,5	18/0,5	36/1.0	36/1.0

### 3.4 Разделы дисциплины и виды занятий (заочная форма обучения)

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем, час / з.е.				
		Всего	лекции	практические занятия	лабораторные работы	самостоятельная работа
1	Основные постулаты квантовой механики	5/0.14	1/0.03	-	-	4/0.11
2	Квантово-химические расчеты	35/0.97	-	1/0.03	2/0.06	32/0.88

3	Электронное строение атома	2/0.06	-	-	-	2/0.06
4	Электронное строение молекул	2/0.06	-	-	-	2/0.06
5	Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом	2/0.06	-	-	-	2/0.06
6	Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	14/0.385	-	-	-	14/0.385
7	Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	14/0,385	-	0.5/0.015	-	13.5/0.37
8	ИК-спектроскопия	16/0.44	0.5/0.015	-	1/0.03	14.5/0.395
9	Спектроскопия ЯМР	18/0,5	0.5/0.015	0.5/0.015	1/0.03	16/0.44
	<i>Итого:</i>	108/3.0	2/0,06	2/0,06	4/0.12	100/2.76

### 3.5 Содержание разделов дисциплины

#### Основные постулаты квантовой механики.

Волновая функция и уравнение Шредингера. Природа электрона. Операторы физических величин: координаты  $x, y, z$ ; функция от пространственных координат; проекция импульса на ось; вектор импульса; функция от вектора импульса; кинетическая энергия; момент импульса; квадрат момента импульса; потенциальная энергия; гамильтониан частицы и системы частиц; спин электрона; полный момент импульса электрона и спин-орбитальное взаимодействие. Принцип неопределенности Гейзенберга. Разделение пространственной и спиновой составляющей волновой функции. Уравнение Шредингера в матричной форме. Стационарные состояния

#### Квантово-химические расчеты.

Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Разделение электронного и ядерного движения. Молекулярная механика. Полуэмпирические методы. Метод Хартри-Фока. Метод функционала электронной плотности (DFT). Базисные наборы.

Расчет геометрии молекул, их электронного строения и энергии методом DFT.

#### Электронное строение атома.

Электронное строение атома. Квантовые числа: главное, орбитальное, магнитное, спиновое. Атомные орбитали. Заполнение атомных орбиталей электронами.

#### Электронное строение молекул.

Электронное строение двухатомных молекул (водорода, азота). Молекулярные орбитали. Теория ЛКАО. Связывающие, антисвязывающие, несвязывающие молекулярные орбитали.  $\delta$ ,  $\pi$ -орбитали. Гетероатомные полиатомные молекулы. Гибридизация и теория (метод)

#### Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом.

Электромагнитное излучение. Квантованность. Фотон. Энергия фотона. Спектр электромагнитного излучения и энергетические переходы вещества, связанные с его поглощением. Типы спектроскопии

#### Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени.

Возбужденные состояния, спиновая мультиплетность, диаграммы состояний. Спектры поглощения. Факторы, влияющие на интенсивность спектров поглощения:

приближение Борна-Оппенгеймера; правила отбора; принцип Франка-Кондона; спин и спин-орбитальное взаимодействие; электронный момент перехода и поляризация; вибронное взаимодействие и запрещенные переходы; перекрывание орбиталей. Типы переходов. Свойства возбужденных состояний: геометрия; полярность, энергия, влияние растворителя. Расчет электронных спектров поглощения методом функционала электронной плотности, разрешенным во времени (TDDFT). Практические аспекты. Визуализация.

#### **Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени.**

Полная диаграмма Яблонского. Излучательные переходы: флюоресценция, фосфоресценция, замедленная флюоресценция. Безизлучательные переходы: внутренняя конверсия, интеркомбинационная конверсия. Спектры люминесценции. Стоксов сдвиг. Квантовый выход. Закон энергетической щели. Расчет электронных спектров испускания методом TDDFT.

#### **ИК-спектроскопия.**

Колебательные переходы. Модель двухатомной молекулы как гармонического осциллятора. Закон Гука. Правила отбора для ИК-спектроскопии. Типы колебаний: валентные и деформационные. Симметричные и асимметричные колебания. Взаимодействие колебаний. Резонанс Ферми.

Расчет ИК-спектров методом DFT. Визуализация

#### **Спектроскопия ЯМР.**

Спин и магнитный момент ядра и его взаимодействие с внешним магнитным полем. Энергия ядер в магнитном поле. Экранирование ядер электронами. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность. Связь константы ССВ с геометрией молекулы. Расчет химических сдвигов ядер квантово-химическими методами.

### **3.6 Тематика практических занятий и лабораторных работ**

<b>Раздел, тема дисциплины</b>	<b>Тема практического занятия</b>	<b>Наименование лабораторной работы</b>
Квантово-химические расчеты	Метод DFT. Функционалы и базисы	Расчет геометрии и энергии органических молекул
Квантово-химические расчеты	Анализ молекулярных орбиталей	Визуализация и анализ молекулярных орбиталей
Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	Электронные переходы. Диаграмма Яблонского	Расчет электронных спектров поглощения
Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	Излучательные и безизлучательные переходы	Расчет электронных спектров испускания
ИК-спектроскопия	Типы и энергия колебаний	Расчет ИК-спектров
Спектроскопия ЯМР	Химический сдвиг	Расчет ЯМР-спектров
Спектроскопия ЯМР	Спин-спиновое взаимодействие	Расчет геометрии и энергии органических молекул

### **3.7 Самостоятельная работа**

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по тематическим блокам дисциплины, включая:

- библиографию;
- публикации (в том числе электронные);
- научно-исследовательскую литературу.

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

**3.8 Контрольные работы** – не предусмотрены.

**3.9 Список вопросов для промежуточного контроля** – не предусмотрен.

**3.10 Тематика рефератов** – не предусмотрена.

**3.11 Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты)** - не предусмотрены.

#### **4 ОРГАНИЗАЦИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

**4.1 Текущий контроль** - в рамках собеседования по итогам выполнения лабораторных работ.

**4.2 Промежуточный контроль** – зачет по итогам собеседования по окончании освоения дисциплины.

**4.3 Итоговый контроль** – в рамках государственного экзамена.

#### **5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

При промежуточном контроле применяется система «зачтено/не зачтено» с учетом критериев, представленных в табл.:

Оценка	Критерии
Зачтено	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве или в достаточной степени овладел знаниями, показал все (как минимум основные) требуемые умения и навыки
Не зачтено	Аспирант не владеет основными умениями и навыками

Оценка уровня знаний при итоговом контроле осуществляется в соответствии с положением о Государственной итоговой аттестации.

#### **6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**

##### **6.1 Основная литература**

1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.

2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2010. 496 с.

3. Cramer C.J. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Second addition. John Wiley and Sons, Ltd. 596 p.

##### **6.2 Дополнительная литература**

1. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.  
 2. Сильверштейн Р., Брасслер Г., Морил Т. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Мир, 1977.

3. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М.: Мир, 1992.

4. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М.: Высшая школа, 1971.



### 6.3 Учебно-методические материалы по дисциплине

Кожевников Д.Н., Прохоров А.М. Электронная абсорбционная и люминесцентная спектроскопия. Теория и практика. Методические указания. Екатеринбург: УрФУ. 2010.

### 6.4 Программное обеспечение и интернет-ресурсы

#### *Электронные образовательные ресурсы*

Механизмы органических реакций. [www.chemtube3d.com](http://www.chemtube3d.com)

Периодическая таблица элементов. [www.ptable.com](http://www.ptable.com)

Интерактивное приложение к учебнику Keeler J., Wothers P. Chemical structure and reactivity. [www.oup.com/uk/orc/bin/9780199289301/01student/weblinks/](http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780199289301/01student/weblinks/)

#### *Программное обеспечение*

Программы пакета Microsoft Office;

Пакет программ для квантово-химических расчетов Orca 2.8.0

Визуализатор пространственной структуры и молекулярных орбиталей Chemcraft

1.6

Редактор химических формул. ISIS/Draw 2.5

#### *Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы*

Химическая энциклопедия (*сайт [www.ximuk.ru](http://www.ximuk.ru)*)

<http://ru.wikipedia.org> – Именные реакции в органической химии

<http://en.wikibooks.org>

<http://www.alhimikov.net> – Электронный учебник по органической химии

<http://www.chemistry.ssu.samara.ru/chem4/link211.htm>

<http://stavrop.fcior.edu.ru/card/1339/laboratornaya-rabota-konstruirovanie-mehanizmov-himicheskikh-reakciy-po-teme-kislorodosoderzhashie-or.html> - Федеральный центр образовательных ресурсов

<http://nehudlit.ru/books>

Информационные сервисы: Sciencedirect, Elibrary, Chemtube3D.

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - <http://cnb.uran.ru/>

## 7 МАТЕРИАЛЬНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (*Современные приборы, установки, необходимость специализированных лабораторий и классов*)

Институт располагает современным приборным парком для анализа состава и изучения структуры и свойств органических соединений, включая:

- ЯМР, хроматомасс-спектрометрию, ИК-, КР и УФ- спектроскопию;
- высокоэффективную жидкостную и газо-жидкостную хроматографию;
- рентгеноструктурный анализ;
- поляриметрию;
- автоматического СНИ анализа;
- проведения реакций при высоком давлении

и др.

Центр коллективного пользования «Спектроскопия и анализ органических соединений» института (ЦКП САОС)), имеет Аттестат признания компетентности испытательной лаборатории (центра) № 0011, рег. № РОСС RU.В503.04НЖ00.66.04.0009.

Группа элементного анализа ИОС УрО РАН признана компетентной в целях выполнения работ по сертификационным испытаниям в Системе добровольной сертификации нанопродукции. С 2009 г. группа входит в состав Испытательного центра веществ, материалов и продукции наноиндустрии в УрФО.

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы.

