



UNIwersytet
IM. ADAMA MICKIEWICZA
W POZNANIU

Metody ustalania struktury biocząsteczek

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia medyczna z projektowaniem leków		Cykl dydaktyczny 2023/24
Specjalność -		Kod zajęć 02CMLS.14K.01994.23
Jednostka organizacyjna Wydział Chemii		Języki wykładowe polski
Poziom studiów studia pierwszego stopnia		Obligatoryjność Obowiązkowy
Forma studiów studia stacjonarne		Blok zajęciowy Przedmioty kierunkowe
Profil studiów profil ogólnoakademicki		
Koordynator zajęć	Piotr Przybylski	
Prowadzący zajęcia	Piotr Przybylski, Krystian Pyta	
Okres Semestr 3	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia • Wykład: 15, Egzamin • Laboratorium: 30, Zaliczenie z oceną	Liczba punktów ECTS 4

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przekazanie podstawowej wiedzy o sposobach oddziaływania promieniowania elektromagnetycznego z materią oraz zjawiskach absorpcji, emisji i rozpraszania światła.
C2	Zapoznanie ze szczegółową wiedzą dotyczącą metod absorpcyjnych stosowanych w chemii organicznej.
C3	Przekazanie informacji dotyczących warunków pomiarów spektroskopowych.
C4	Wykształcenie umiejętności interpretacji widm przy określaniu struktury związków organicznych.
C5	Wykształcenie potrzeby korzystania ze źródeł literaturowych i umiejętnego posługiwania się tablicami.

Wymagania wstępne

Brak wymagań wstępnych.

Efekty uczenia się dla zajęć

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
Wiedzy - Student/ka:			
W1	zna podstawy metod spektroskopowych, dualistyczną naturę promieniowania elektromagnetycznego i rodzaje przejść energetycznych w cząsteczkach.	CML_K1_W01, CML_K1_W02, CML_K1_W04, CML_K1_W06	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
W2	zna sposób przygotowywania próbek i podstawy działania spektrometrów.	CML_K1_W01, CML_K1_W02, CML_K1_W04, CML_K1_W06	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
W3	zna i rozumie podstawy magnetycznego rezonansu jądrowego oraz warunki uzyskania rezonansu i rejestracji widm dla różnych jąder.	CML_K1_W01, CML_K1_W02, CML_K1_W04, CML_K1_W06	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
W4	zna podstawy spektroskopii korelacyjnej 2D-NMR i interpretacji widma dwuwymiarowe.	CML_K1_W01, CML_K1_W02, CML_K1_W04, CML_K1_W06	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
W5	zna podstawy rejestrowania widm FT-IR i techniki rejestrowania i przygotowywania próbek w różnym stanie skupienia. Zna rodzaje drgań oscylacyjnych i ich możliwe położenia w widmach w podczerwieni.	CML_K1_W01, CML_K1_W02, CML_K1_W04, CML_K1_W06	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
Umiejętności - Student/ka:			
U1	potrafi łączyć wartości położenia i intensywności pasm absorpcji w widmach UV-Vis ze strukturą cząsteczek.	CML_K1_U01, CML_K1_U03, CML_K1_U09	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
U2	potrafi wykorzystać informacje uzyskiwane z widm protonowych i węglowych do interpretacji struktury związków organicznych.	CML_K1_U01, CML_K1_U03, CML_K1_U09	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
U3	potrafi posługiwać się tablicami, bazami danych oraz korzystać z innych opracowań naukowych przy interpretacji widm.	CML_K1_U01, CML_K1_U03, CML_K1_U09	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
U4	potrafi określać struktury związków organicznych na podstawie interpretacji danych uzyskiwanych z różnych metod spektroskopowych.	CML_K1_U01, CML_K1_U03, CML_K1_U09	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne
Kompetencji społecznych - Student/ka:			
K1	jest gotów/gotowa wskazać wady i zalety stosowania różnych metod spektroskopowych oraz ich wkład w rozwój nauki i potrzebę udoskonalania tych metod instrumentalnych.	CML_K1_K01, CML_K1_K02	Egzamin pisemny, Kolokwium pisemne

Treści programowe dla zajęć

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
1.	Sposoby oddziaływania promieniowania elektromagnetycznego z materią, promieniowanie elektromagnetyczne jako fala i jako kwant energii, równanie Plancka, rodzaje przejść energetycznych w cząsteczce, stany swobody, warunki rejestracji widm, przygotowanie próbek w różnych stanach skupienia, dobór rozpuszczalnika, stężenia i rodzaju kuwety, pomiary intensywności pasm, transmitancja i absorbancja, analiza ilościowa, opis działania spektrometrów, poznanie aparatury dostępnej w Środowiskowym Laboratorium Aparatury Chemicznej.	W1, W2, K1	Wykład, Laboratorium
2.	Przejścia elektronowe. Grupy chromoforowe, przesunięcia bathochromowe i hipsochromowe, zależność położenia pasm absorpcji w widmach UV-Vis od struktury cząsteczki układy polienowe i polienonowe, korzystanie z tablic korelacyjnych, kolor i barwa, widma CD.	W1, W2, U1, K1	Wykład, Laboratorium
3.	Rodzaje drgań oscylacyjnych, wstępna interpretacja widm w podczerwieni, przypisanie pasm absorpcji grupom funkcyjnym i fragmentom strukturalnym w cząsteczce, wiązanie wodorowe i procesy asocjacji w analizie widm w podczerwieni. Sposoby rejestracji widm próbek w różnym stanie skupienia (pastylki KBr, ATR, film, roztwór). Widma VCD.	W1, W5, U3, U4, K1	Wykład, Laboratorium
4.	Warunek rezonansu, rejestracja widm protonowego i węglowego rezonansu jądrowego, jądrowy efekt Ovenhausera, wartości przesunięć chemicznych w widmach protonowego magnetycznego rezonansu jądrowego, efekty diamagnetyczne i anizotropowe, korzystanie z tablic, analiza stałych sprężenia i intensywności sygnałów w widmach H-1 NMR, układy spinowe, widma I- i II-rzędu, równocześnieść chemiczna i magnetyczna protonów i grup protonów oraz analiza konformacyjna, przypisanie wartości przesunięć chemicznych odpowiednim atomom węgla w widmach magnetycznego rezonansu jądrowego C-13.	W2, W3, U2, U3, K1	Wykład, Laboratorium
5.	Techniki dwuwymiarowe w spektroskopii NMR, korzyści i ograniczenia jakie związane są z poszczególnymi technikami spektroskopowymi.	W1, W4, U2, U4, K1	Wykład, Laboratorium
6.	Interpretacja widm (o zwiększającej się skali trudności) dla poszczególnych metod spektroskopowych, łączne użycie metod spektroskopowych przy identyfikacji i ustalaniu struktury nieznanego związku.	W1, W3, W4, W5, U2, U3, U4, K1	Wykład, Laboratorium

Informacje dodatkowe

Forma zajęć	Metody i formy prowadzenia zajęć
Wykład	Wykład z prezentacją multimedialną wybranych zagadnień, Wykład konwersatoryjny, Wykład problemowy
Laboratorium	Dyskusja, Metoda analizy przypadków, Uczenie problemowe (Problem-based learning), Rozwiązywanie zadań (np.: obliczeniowych, artystycznych, praktycznych), Metoda ćwiczeniowa

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Egzamin pisemny - pytania otwarte. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%
Laboratorium	<u>Warunkiem klasyfikacji jest obecność na minimum 60% zajęć oraz napisanie trzech kolokwίων tematycznych na minimum 50% każde.</u> Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: • bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się na poziomie minimum 92,0% • dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 84,0% - 91,9% • dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 76,0% - 83,9% • dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 68,0% - 75,9% • dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się w zakresie 60,0% - 67,9% • niedostateczny (ndst; 2,0): brak osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się wynik poniżej 60,0%

Literatura

Obowiązkowa

1. W. Zieliński, A. Rajca „Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych”, WNT, Warszawa, 2000
2. R.M. Silverstein, F. X. Webster, D.I. Kiemle „Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych”, PWN, Warszawa 2008

Dodatkowa

1. M. Szafran, Z. Dega-Szafran (red.) „Określanie struktury związków organicznych metodami spektroskopowymi. (Tablice i ćwiczenia)”, PWN, Warszawa 1988
2. D.L.Pavia, G.M. Lampman, G.S. Kriz, J.R. Vyvyan „Introduction to spectroscopy”, Brooks/Cole, 2009

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć
Wykład	15
Laboratorium	30
Przygotowanie do egzaminu	30

Przygotowanie do zajęć	20
Przygotowanie do zaliczenia	25
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 120
Liczba punktów ECTS	ECTS 4

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Efekty uczenia się dla kierunku

Kod	Treść
CML_K1_K01	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do identyfikacji i oceny problemów poznawczych i praktycznych w zakresie chemii medycznej
CML_K1_K02	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do krytycznej oceny zebranych informacji dotyczących potencjalnych leków w zakresie ich pożytecznej aktywności biologicznej, toksyczności, właściwości fizyko-chemicznych i farmakokinetycznych etc.
CML_K1_U01	Absolwent/ka potrafi stosować terminologię chemiczną zgodną z zaleceniami IUPAC oraz obowiązującym aktualnie systemem norm
CML_K1_U03	Absolwent/ka potrafi analizować właściwości fizyko-chemiczne i strukturę oraz określać czystość związków biologicznie czynnych w oparciu o dobór odpowiednich metod i aparatury
CML_K1_U09	Absolwent/ka potrafi dobierać techniki analizy instrumentalnej w celu rozwiązania prostych problemów chemicznych związanych z identyfikacją i określeniem czystości leków
CML_K1_W01	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia z zakresu chemii oraz chemii medycznej
CML_K1_W02	Absolwent/ka zna i rozumie pojęcia i zależności pozwalające na ilościowy opis zjawisk fizyko-chemicznych istotnych z punktu widzenia projektowania nowych leków
CML_K1_W04	Absolwent/ka zna i rozumie budowę przestrzenną oraz właściwości fizyko-chemiczne poszczególnych grup związków biologicznie czynnych oraz zna możliwości i ograniczenia wykorzystania tych związków w różnego rodzaju terapiach
CML_K1_W06	Absolwent/ka zna i rozumie różne strategie chemiczne otrzymania lub modyfikacji związków biologicznie czynnych pochodzenia naturalnego lub syntetycznego w celu optymalizacji ich aktywności biologicznej