

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

*Факультет физико-математических и естественных наук
Медицинский институт*

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

МАСС-СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Рекомендуется для направления подготовки/специальности

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

**«ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В ПРОИЗВОДСТВЕ И КОНТРОЛЕ КАЧЕСТВА
ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ»**

1. Цели и задачи дисциплины.

Получение представлений об особенностях фрагментации биологически активных соединений в условиях ионизации электронами, навыков получения и анализа совокупности спектральных характеристик аналитов такого рода

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО.

Дисциплина «Масс-спектральный анализ лекарственных средств» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, блока 1 учебного плана по направлению 04.04.01 «Химия». Для успешного освоения дисциплины учащийся магистратуры обязан иметь базовые знания на уровне бакалавра. Владение навыками получения и интерпретации спектральных характеристик органических соединений необходимо для решения самого широкого круга современных научных и технических задач.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Химия природных соединений Фармацевтическая химия Химические методы контроля качества лекарств в мировых фармакопеях Физико-химические основы КК ЛС Методы элементного анализа качества ЛС Оптические методы в ФА Современные информационные технологии в фармации Методика работы с БД НИР	Экспериментальные методы исследования в органической химии Экспериментальные методы исследования в ФА Преддипломная практика
Общепрофессиональные компетенции			
ОПК-1	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	Актуальные задачи современной химии Химия природных соединений Фармацевтическая химия Химические методы контроля качества лекарств в мировых фармакопеях Физико-химические основы КК ЛС Методы элементного анализа качества ЛС Оптические методы в ФА НИР	Преддипломная практика
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Физико-химические основы контроля качества ЛС Оптические методы в фармацевтическом анализе НИР	Преддипломная практика
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н.	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-	Химия природных соединений Фармацевтическая химия Химические методы контроля качества	Экспериментальные методы исследования в органической химии

исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук	лекарств в мировых фармакопеях Физико-химические основы КК ЛС Методы элементного анализа качества ЛС Оптические методы в ФА Современные информационные технологии в фармации Методика работы с БД НИР	Экспериментальные методы исследования в ФА Преддипломная практика
М-ПК-2-н. Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Химия природных соединений Фармацевтическая химия Химические методы контроля качества лекарств в мировых фармакопеях Физико-химические основы КК ЛС Методы элементного анализа качества ЛС Оптические методы в ФА Современные информационные технологии в фармации Методика работы с БД НИР	Экспериментальные методы исследования в органической химии Экспериментальные методы исследования в ФА Преддипломная практика

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
ОПК-1	Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной	ОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента,

	деятельности	моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **3** зачетные единицы.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		3			
Аудиторные занятия (всего)	34	34			
В том числе:					
<i>Лекции</i>	17	17			
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>					
<i>Семинары (С)</i>					
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	17	17			
Самостоятельная работа (всего)	74	74			
Общая трудоемкость	час	108	108		
	зач. ед.	3	3		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Масс-спектрометрия ИЭ в анализе лекарственных средств: принципы	Основные методы ионизации и разделения ионов в масс-спектрометрии. Особенности использования масс-спектрометрии ИЭ в фармацевтическом анализе: методы ввода, применения баз данных масс-спектров

	применения и методы ввода	
2.	Основные механизмы фрагментации соединений в условиях ИЭ на примере УВ	Характерные особенности фрагментации углеводородов различного строения условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами.
3.	Фрагментация биологически активных гетероциклических соединений в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации азот-, кислород-и серосодержащих алифатических и ароматических гетероциклических соединений в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами, орто-эффект.
4.	Фрагментация галогенпроизводных в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации галогенпроизводных в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Полиизотопные элементы и расчет их содержания.
5.	Фрагментация соединений с амино-группой в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации алифатических и ароматических аминов в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Использование дериватизации для изучения аминов с помощью ГХ/МС
6	Фрагментация соединений с гидроксильной группой в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации алифатических спиртов и фенолов, диалкиловых, алкил ариловых и диарилловых эфиров в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами. Аналогии между ионизацией электронами и тандемной масс-спектрометрией
7	Фрагментация соединений с карбоксильной группой в условиях ИЭ	Характерные особенности фрагментации карбоновых кислот, алкиловых и ариловых сложных эфиров, производных фталевой кислоты в условиях масс-спектрометрии с ионизацией электронами.
8	Фрагментация соединений с	Характерные особенности фрагментации аминокислот и их производных в условиях масс-спектрометрии с ионизацией

несколькими функциональными группами в условиях ИЭ	электронами. Использование реагентов Хусека для анализа аминокислот и простейших пептидов методом ГХ/МС. Анализ окси- и оксо-кислот.
--	--

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции	Практ. зан	Лаб. зан.	Семинар	СРС	Всего час.
1.	Масс-спектрометрия ИЭ в анализе лекарственных средств: принципы применения и методы ввода	2		3		11	16
2.	Основные механизмы фрагментации соединений в условиях ИЭ на примере УВ	2		2		8	12
3.	Фрагментация гетероциклических соединений в условиях ИЭ	2		2		10	14
4.	Фрагментация галогенпроизводных в условиях ИЭ	2		2		9	13
5.	Фрагментация соединений с амино-группой в условиях ИЭ	1		2		6	9
6.	Фрагментация соединений с гидроксильной группой в условиях ИЭ	1		2		6	9
7.	Фрагментация соединений с карбоксильной группой в условиях ИЭ	4		2		16	22
8.	Фрагментация соединений с несколькими функциональными группами в условиях ИЭ	3		2		8	13
	Всего	17		17		74	108

6. Лабораторный практикум

На лабораторном практикуме подробно изучаются способы обработки и интерпретации масс-спектров.

* Темы лабораторных работ могут меняться в зависимости от тематики исследовательской работы магистра.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость (час.)
1.	1.	Масс-спектрометрия ИЭ в анализе лекарственных средств: принципы применения и методы ввода	3

2.	2.	Основные механизмы фрагментации соединений в условиях ИЭ на примере УВ	2
3.	3.	Фрагментация гетероциклических соединений в условиях ИЭ	2
4.	4.	Фрагментация галогенпроизводных в условиях ИЭ	2
5.	5.	Фрагментация соединений с amino-группой в условиях ИЭ	2
6.	6.	Фрагментация соединений с гидроксильной группой в условиях ИЭ	2
7.	7.	Фрагментация соединений с карбоксильной группой в условиях ИЭ	2
8	8	Фрагментация соединений с несколькими функциональными группами в условиях ИЭ	2

7. Практические занятия (семинары) – не предусмотрены учебным планом.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

ул. Орджоникидзе, д.3, корп. 1

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы:

ауд.№ 612

Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор BENQ MX661, проектор NEC NP40, экран моторизованный для проекторов, столы; имеется wi-fi.

Научная химическая лаборатория для проведения занятий лабораторного типа, индивидуальных консультаций, Лаборатория ЦКП ФХИ:

ауд.№ 104

Комплект специализированной мебели; специализированное оборудование химической лаборатории: хромато-масс-спектрометр FOCUS-DSQ с турбомолекулярным насосом 250л/с, Газовый баллон (гелий), компьютер, вытяжной шкаф, кондиционер, имеется выход в интернет.

9. Информационное обеспечение дисциплины

1. Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions № 86626883 (продлевается каждый год, при этом программе присваивается новый номер), ISIS Draw. Интернет поисковики FireFox и Opera, OMNIC 5735FB0C-6DFA-4240-BA3F-26BE4B3B3A86 Xcalibur 1.4 SR1

Интернет-сайт кафедры <http://web-local.rudn.ru/web-local/kaf/rj/index.php?id=82&p=2026>.

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН
<http://lib.rudn.ru:8080/MegaPro/Web>
- База данных Scopus
<https://www.scopus.com/>
- База данных Web of Science
http://apps.webofknowledge.com/WOS_GeneralSearch_input.do?product=WOS&search_mode=GeneralSearch&SID=N1cZ3JYEClUJdm14VTK&preferencesSaved=
- Organic Chemistry Portal
<http://www.organic-chemistry.org/>
- База данных Reaxys
<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/search.do>
- Электронная база
webbook.nist.gov

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

а) основная литература

1. Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии : учебное пособие / А.Т. Лебедев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва : Техносфера, 2015. - 704 с. : ил.,табл., схем. - (Мир химии). - Библиогр.: с. 638 - 681. - ISBN 978-5-94836-409-4 ;
2. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе / 2. Н.Г. Ярышев, Ю.Н. Медведев, М.И. Токарев и др. - Издание второе, переработанное и дополненное. - Москва : Прометей, 2015. - 196 с. : схем., ил., табл. - ISBN 978-5-9906134-6-1 ;

б) дополнительная литература

1. Лебедев, А.Т. Масс-спектрометрия для анализа объектов окружающей среды / А.Т. Лебедев ; пер. с англ. под ред. А.Т. Лебедева. - Москва : Техносфера, 2013. - 632 с. : ил., схем. - (Мир химии). - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-94836-363-9

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Условия и критерии выставления оценок: От студентов требуется посещение лекций и лабораторных занятий, обязательное участие в аттестационно-тестовых испытаниях, выполнение заданий преподавателя. Для оценки текущих контрольных работ и итоговой аттестации применяется балльно-рейтинговая система оценки знаний.

Лекции:

Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий,

словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации.

Подготовка к промежуточной аттестации

При подготовке к итоговому контролю необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу.

Методические указания и рекомендации по выполнению лабораторных работ, практических или семинарских занятий, курсовых работ (проектов).

Рекомендации к выполнению лабораторной работы № 1-8

Подготовка к работе:

- а) изучение теоретических основ работы по разделам учебника, указанным в описании;
- б) ознакомление с предстоящей работой по ее описанию и составление плана эксперимента;
- в) выписать из учебника или справочника значения количественных величин, которые понадобятся для расчетов;
- г) выписать в лабораторный журнал - форму лабораторного отчета, заполнив те разделы, которые могут быть заполнены до выполнения эксперимента;
- д) письменно ответить на контрольные вопросы.

Выполнение работы в лаборатории.

Внимательно изучить «специальные правила работы в химической лаборатории» и «Правила техники безопасности», вывешенные на лабораторном стенде (или имеющиеся в лаборатории) и неукоснительно их соблюдать:

- а) соблюдать чистоту и порядок на рабочем месте;
- б) перед началом работы проверьте по списку, приведенному в описании работы, наличие на вашем рабочем месте необходимого оборудования и реактивов; убедитесь в чистоте химической посуды, пипеток, кювет, шприцов и реактивов, прессформ при необходимости вымойте посуду;
- в) взяв с полки реагент и отобрав нужное количество, поставьте его на место; в конце работы приведите рабочее место в первоначальный порядок, расставив все по местам.

Правила работы студентов в лаборатории масс-спектрометрии.

- а) студенты допускаются к работе в лаборатории только после прохождения инструктажа по технике безопасности;
- б) нельзя заходить в помещение, где размещены масс-спектрометры, без преподавателя или лаборанта;
- в) включать и выключать масс-спектрометры, а также производить какие-либо манипуляции возле работающих приборов можно только в присутствии преподавателя или лаборанта;
- г) при приготовлении образцов для анализа необходимо соблюдать правила работы и техники безопасности, принятые при работе с химическими реактивами в химических лабораториях: работать в халате, пользоваться резиновыми перчатками и при включенной вентиляции.

Правила оформления работы в лабораторном журнале.

1. Название работы.
2. Цель работы.
3. Краткое теоретическое введение (основные законы и формулы, уравнения или графики, относящиеся к теме лабораторной работы).
4. Экспериментальная часть:
 - список реактивов и оборудования;
 - схема прибора или установки;
 - конкретное задание на лабораторную работу;

- условия проведения эксперимента (температура, концентрации растворов, длины волн и т.д.);
- результаты измерений в виде таблиц и графиков;
- расчёты по экспериментальным данным;
- оценка погрешности измерений.

5. Выводы или заключение о результатах данной лабораторной работы.

6. Ответы на вопросы к защите лабораторной работы.

Примечание.

Все записи в тетради должны быть выполнены чернилами, графики – на миллиметровой бумаге только карандашом. Каждый график должен быть озаглавлен и вклеен в тетрадь.

Правила написания и оформления контрольных работ

- Контрольные работы выполняются в отдельной ученической тетради, на обложке которой указаны название дисциплины, фамилию и инициалы, специальность, курс. Перед каждой контрольной работой указывается номер контрольной работы, вариант задания, дата.
- Решение задачи должно сопровождаться составлением таблиц с отнесением полос поглощения в спектре к соответствующим группам соединения
- При выполнении тестовых работ студентам разрешается использование справочной литературы.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Масс-спектральный анализ лекарственных средств» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

доцент,
кафедры органической химии

Борисов Р. С.

Руководитель программы

Заведующий кафедрой
Органической химии

Воскресенский Л. Г.

Заведующий кафедрой
органической химии

Воскресенский Л. Г.