

RTU studiju kurss "Organisko savienojumu kvalitatīvās analīzes praktikums"**32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte****Vispārējā informācija**

Kods	ĶOS720
Nosaukums	Organisko savienojumu kvalitatīvās analīzes praktikums
Studiju kursa statuss programmā	Brīvās izvēles
Atbildīgais mācītbspēks	Māris Turks - Doktors, Dekāns
Mācītbspēks	Vitālijs Rjabovs - Doktors, Docents
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 4.5 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV, EN
Anotācija	Studiju kurss veidots kā semināru un laboratorijas darbu kopums, kuros studenti apgūst organisko savienojumu kvalitatīvās analīzes praktiskos aspektus. Praktiskās kompetences tiek iegūtas gan klasiskajā kvalitatīvajā analīzē, gan moderno spektrālo metožu pielietojumā. Galvenā uzmanība ir pievērsta kodolmagnētiskās rezonanses (KMR) spektroskopijas, infrasarkanā starojuma absorbcijas (IS) spektroskopijas un maspektrometrijas (MS) metožu praktiskam pielietojumam. Studiju kursa absolventi prot izvēlēties nepieciešamo metodi vai to kopumu, lai pierādītu kāda mazmolekulāra organiska savienojuma struktūru.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir studējošo praktisko kompetenču veidošana un stiprināšana organisko savienojumu kvalitatīvās analīzes jomā. Studiju kursa uzdevumi ir sniegt studentiem teorētiskās zināšanas un praktiskās iemaņas darbā ar zinātniskām iekārtām, kas ļaus viņiem pilnveidot un attīstīt iepriekš apgūtās teorētiskās prasmes: 1)veikt vielu klasisko kvalitatīvo analīzi, kas balstīta krāsu reakcijās un izdarīt secinājumus par savienojumu struktūru vai struktūrelementiem; 2)patstāvīgi reģistrēt vielu 1D- un 2D-KMR spektrus, tos analizēt un pielietot savienojumu struktūras atšifrēšanā; 3)patstāvīgi reģistrēt vielu IS spektrus, tos analizēt un pielietot savienojumu struktūras atšifrēšanā; 4)patstāvīgi uzņemt vielu GH-MS un LC-MS hromatogrammas, kas papildinātas ar attiecīgajiem maspektriem, tās analizēt un pielietot savienojumu struktūras atšifrēšanā.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Sagatavošanās semināriem un laboratorijas darbiem. Laboratorijas darbu protokolu noformēšana. Mājasdarbu (savienojumu struktūru atšifrēšana no dotajiem datiem) izpildīšana, kuru risinājumi tiek apspriesti semināros. Sagatavošanās kolokvijam un eksāmenam.
Literatūra	Obligātā/Obligatory: Handbook of Spectroscopy, 4 Volume Set, 2nd Edition. G. Gauglitz, D. S. Moore (Eds). Wiley-VCH, 2014. S. Berger, D. Sicker. Classics in Spectroscopy. Wiley-VCH, 2009. Introduction to Experimental Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Practical Methods. M. Tasumi (Ed.), Wiley, 2014. Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J. Spectrometric identification of organic compounds. 7th ed. N.Y.: Wiley, 2005. 502 p. Shriner, R. L.; et al. The Systematic Identification of Organic Compounds; 8th edition; John Wiley & Sons, 2004. Papildu/Additional: M. Findeisen, S. Berger. 50 and More Essential NMR Experiments: A Detailed Guide. Wiley-VCH, 2013. Pretsch E., Bühlmann P., Badertscher M. Structure determination of organic compounds. Tables of spectral data, 4th revised and enlarged ed. Berlin: Springer, 2009. 433 p. S. Berger, S. Braun. 200 and More NMR Experiments: A Practical Course. Wiley-VCH, 2004. Field, L. D., Sternhel, S., Kalman, J. R. Organic Structures from Spectra. 4th ed. Chichester: Wiley, 2008. 468 p. Breitmaier, E. Structure elucidation by NMR in organic chemistry. A practical guide. 3rd ed. Chichester: Wiley, 2002. 258 p. R. G. Linington, P. G. Williams, J. B. MacMillan, Problems in Organic Structure Determination: A Practical Approach to NMR Spectroscopy, CRC Press, 2015. B. N. Pramanik, A. K. Ganguly, M. L. Gross. Applied Electrospray Mass Spectrometry: Practical Spectroscopy Series: Volume 32, CRC Press, 200. E. de Hoffmann, V. Stroobant. Mass Spectrometry, Principles and Applications, Third Edition. Wiley, 2007. J. T. Watson, O. D. Sparkman. Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation, 4th Edition. Wiley, 2007. Mass Spectrometry for Drug Discovery and Drug Development. W. A. Korfmacher (Ed), Wiley 2013.
Nepieciešamās priekšzināšanas	Pamatzināšanas organiskajā ķīmijā un KMR spektroskopijā.

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienes studijas		Nepilna laika neklātienes studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
Ievads organisko savienojumu klasiskajā kvalitatīvajā analīzē. Funkcionālo grupu krāsu reakcijas. Organisko savienojumu optiskās aktivitātes un hirālu vielu enantiomērā pārkuma noteikšana.	6	6	0	0

Infrasarkano spektru uzņemšana tīrai vielai, KBr tabletē, nujolā un šķīdumā. Funkcionālo grupu analīze pēc IS spektru raksturīgajām absorbcijas joslām.	6	6	0	0
KMR spektru uzņemšana un vielas struktūras atšifrēšana pēc to COSY, HMQC, HMBC spektriem un 13C-DEPT un 13C-APT spektriem. IS un KMR spektrālo datu kombinēšana vielas struktūras atšifrēšanā.	6	6	0	0
Vielu konformācijas un relatīvās konfigurācijas pierādīšana, lietojot spinu sadarbības konstanšu analīzi un 2D-NOESY spektrus. Dubultrezonanses pielietojums spinu sadarbības konstanšu noteikšanā.	6	6	0	0
Kolokvijs par iepriekšējo nodarbību tēmām.	4	4	0	0
Vielu masspektrālā fragmentācija atkarībā no jonizācijas metodes un jaudas. GH-MS un ŠH-MS metodes vielu maisījumu analīzē. IS, MS un KMR spektrālo datu kombinēšana vielas struktūras atšifrēšanā.	6	6	0	0
Organisko savienojumu absolūtās konfigurācijas pierādīšana, reģistrējot to stereodefinēto atvasinājumu KMR spektrus (Mošera, mandelātu u.c. esteru un amīdu pielietojums).	6	6	0	0
19F un 31P spektru reģistrēšana un savienojumu struktūras pierādīšana. Cītu magnētiski aktīvo atomu ietekme uz organisko savienojumu 1H un 13C spektru signālu šķelšanos.	6	6	0	0
Tautomēro līdzsvaru analīze ar KMR un IS spektriem. Temperatūras ietekme uz KMR spektriem. Rotamēru analīze.	6	6	0	0
Konsultācija.	2	2	0	0
Eksāmens.	6	6	0	0
Kopā:	60	60	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Izprot organisko savienojumu klasisko kvalitatīvo analīzi, kas balstīta krāsu reakcijās, un māk izdarīt secinājumus par savienojumu struktūru balstoties uz šīs analīzes datiem.	Pārbaudes veidi: laboratorijas darbi, kolokvijs un eksāmens. Kritēriji: students spēj noteikt enantiomēri bagātinātu savienojumu enantiomēro pārkāpumu no īpatnējās optiskās griešanas datiem.
Izprot organisko savienojumu 1D- un 2D-KMR spektrus.	Pārbaudes veidi: laboratorijas darbi, mājasdarbi, kolokvijs un eksāmens. Kritēriji: students prot reģistrēt KMR spektrus, analizēt un pielietot tos savienojumu struktūras atšifrēšanā.
Izprot organisko savienojumu IS spektrus.	Pārbaudes veidi: laboratorijas darbi, mājasdarbi, kolokvijs un eksāmens. Kritēriji: students prot reģistrēt IS spektrus, analizēt un pielietot tos savienojumu struktūras atšifrēšanā.
Izprot organisko savienojumu masspektrus un molekulārā jona fragmentāciju.	Pārbaudes veidi: laboratorijas darbi, mājasdarbi, kolokvijs un eksāmens. Kritēriji: students prot uzņemt organisko savienojumu GH-MS un ŠH-MS hromatogrammas, kas papildinātas ar attiecīgajiem masspektriem, analizēt un pielietot tos savienojumu struktūras atšifrēšanā.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
Laboratorijas un mājas darbi	30
Kolokvijs	35
Eksāmens	35
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi			Brīvās izvēles pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	4.5	0.0	1.0	2.0		*			*	