

Раздел 1. Учебная дисциплина «Физические методы исследования»

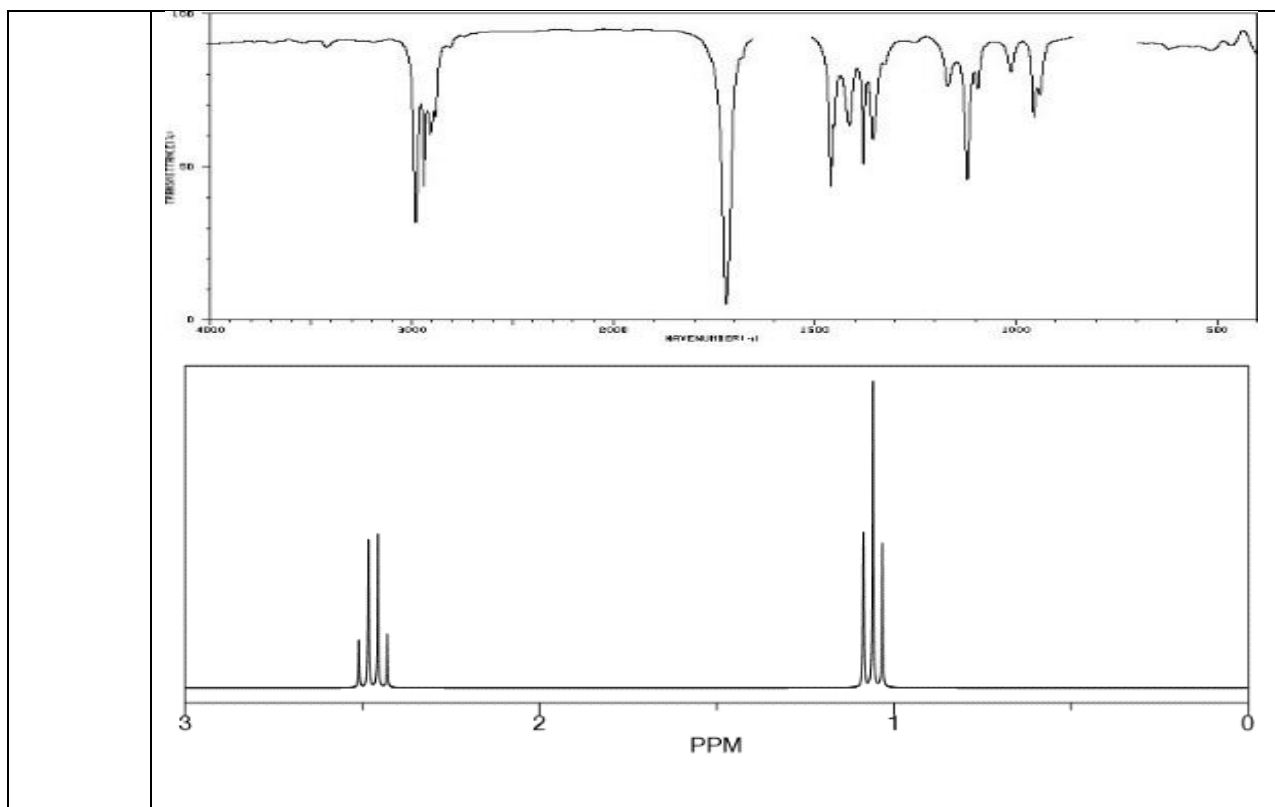
Ситуационные задания

1. Предложите метод исследования глубины диффузионного проникновения атомов никеля в образце, представляющем собой пленку никеля на кремнии, прогретую при 400 °С.

Решение

Для изучения диффузии никеля в кремний можно использовать три метода: 1) метод вторично-ионной спектроскопии в сочетании с ионным травлением; 2) метод оже-электронной спектроскопии в сочетании с ионным травлением; 3) метод обратного резерфордовского рассеяния. Первые два метода являются разрушающими и предполагают создание ионного кратера травления, достигающего границы раздела «никель-кремний». Третий метод является неразрушающим; при этом возможности получения пространственного профиля распределения концентрации никеля в образце будет определяться большим различием в величине кинематических факторов для никеля и кремния, в результате чего сигнал, связанный с никелем будет проявляться отдельно от сигнала, связанного с кремнием.

2. Для органического вещества были получены спектр инфракрасного поглощения и спектр ядерного магнитного резонанса на протонах (см. рис). Сделайте вывод о том, какую структуру имеет это вещество, если его молекулярная формула $C_5H_{10}O$. При этом учтите, что карбонильная группа проявляется в ИК спектре при 1720 см^{-1} , а области проявления карбоксильной и альдегидной групп в ЯМР спектре $> 3\text{ м.д.}$



3. Предложите неразрушающий метод определения концентрации мышьяка в образце обоев начала XIX века (музейный экземпляр).

4. Предложите метод определения концентрации дисульфидных мостиков в волосах и ее изменения под действием испытываемого косметического средства по уходу за волосами (дисульфидные мостики отвечают за прочность и структуру волос).

Литература

1. Ярышев Н.Г., Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе : Учебное пособие / Н. Г. Ярышев, Ю. Н. Медведев, М. И. Токарев, А. В. Бурихина, Н. Н. Камкин - М. : Прометей, 2015. –196 с.

2. Физические методы исследования в химии : учебное пособие / В.В. Луков, И.Н. Щербаков ; Южный федеральный университет. – Ростов-на-дону : Издательство Южного федерального университета, 2016. – 216 с.

3. Оджаев В.Б., Свиридов Д.В., Карпович И.А., Понарядов В.В. Современные методы исследования конденсированных материалов. Минск : БГУ, – 2003.

4. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М. : Мир, АСТ, 2003.

Раздел 2. Учебная дисциплина

«Полимерные материалы медицинского назначения»

Ситуационные задания

1. Предложите состав и условия синтеза какого-либо лекарственного сополимера с «собственной» активностью. Приведите уравнение используемой реакции. Опишите структуру и свойства предложенного сополимера.

2. Предложите состав и условия синтеза какого-либо интерполимерного комплекса, примененного в медицине. Приведите уравнение используемой реакции. Опишите структуру, свойства и назначение предложенного комплекса.

3. Предложите состав, условия получения и модификации конструкционного полимерного материала, примененного для создания гемосовместимых эндопротезов. Приведите уравнения необходимых для получения реакций и условия их протекания.

4. Приведите пример полимерной нанопористой пленки медицинского назначения, опишите метод ее получения, структуру, свойства и применение.

5. Опишите на конкретных трех примерах принципы функционирования гемо- и энтеросорбентов, их состав, структуру и свойства.

6. Предложите состав и условия получения какого-либо геля медицинского назначения. Опишите структуру, свойства и область применения.

Литература

1. Шишенок, М.В. Модификация полимеров: учебник для студентов учреждений высшего образования по группе специальностей «Химия» и специальностям «Производство изделий из композиционных материалов», «Производство и переработка полимерных материалов» / М.В. Шишенок. – Минск : Адукацыя і выхаванне, 2024. – 328 с.

Раздел 3. Учебная дисциплина «Технология лекарств»

Ситуационные задания

1. В отделе контроля качества при поступлении партии таблеток без оболочки, полученных методом прямого прессования, выявлено, что при испытании на истираемость таблетки теряют в массе более 1%. Предположите, допустимо ли это; если нет, что было нарушено в технологии производства? Известно, что химический состав вспомогательных веществ соответствует требуемому.

Решение

Основные требования, предъявляемые к таблеткам – соответствие внешнему виду, механическая прочность и распадаемость. Соответственно, в ходе производства партии был нарушен регламент, в результате чего механическая прочность таблетки не соответствует нормам. Механическая прочность таблетки зависит от нескольких факторов: состав и природа веществ; наличие связывающих и разрыхляющих веществ; влажность; давление прессования.

Одним из способов определения механической прочности таблетки являются испытания на истирание и сжатие таблеток без оболочки. При проведении испытания на истирание потеря в массе таблеток не должна превышать 1 %. Соответственно, можно предположить, что в ходе производства данной партии таблетлируемая масса не была увлажнена достаточным образом; давление прессования не соответствует нужному (неправильно подобран тип прессования, недостаточное давление, приложенное к таблетлируемой массе при прессовании), поскольку состав разрыхляющих и связывающих веществ соблюден согласно условию задачи.

2. В ходе испытания таблеток, покрытых оболочкой, на распадаемость, выяснилось, что время распадаемости превышает 30 минут. Известно, что в качестве среды растворения использовали дистиллированную воду согласно общей фармакопейной статье, давление прессования таблетки подобрано оптимально. Предположите, что могло быть нарушено в ходе технологии изготовления.

3. При изготовлении партии таблеток, покрытых оболочкой, были проведены тесты на прочность на сжатие и прочность на истирание. Получены следующие результаты: в ходе испытания на истирание потеря в массе для таблеток составила 0,001%, в ходе испытания на прочность на сжатие – затраченная сила в среднем равнялась 100 Н при диаметре таблеток 6 мм. Проходит ли партия таблеток тесты? Прокомментируйте.

4. При изготовлении партии таблеток без оболочки (диаметр таблеток 10 мм) оценивали их внешний вид. В ходе осмотра обнаружено, что на всех 10 проверяемых таблетках присутствуют надписи (нанесена дозировка препарата и название), на некоторых присутствуют сколы и углубления, отсутствует риска. Прокомментируйте, соответствуют ли таблетки испытанию на внешний вид.

5. Для оценки степени растворения таблеток, покрытых оболочкой, использовали прибор типа «вращающаяся корзинка». Известно, что в составе препарата три активных вещества. Каким образом необходимо проводить оценку теста на растворение? Ответ прокомментируйте.

6. На чем основано прогнозирование биологической и фармакологической активности лекарственных средств? Предложите стратегию поиска нового противогрибкового препарата, что особенно важно в связи с ростом уровня резистентности к этим препаратам.

7. Предложите микробиологический метод получения стероидного гормона на примере представителя глюкокортикоидов. Какие функции он выполняет в организме и как эти функции связаны со структурой вещества? В какой лекарственной форме (жидкая, мягкая, твердая) предпочтительно его использование?

8. Предложите на конкретном примере стратегию определения белка-мишени) при помощи меченых биомолекул.

Литература

1. Логинова, Н.В. Общая фармацевтическая химия : учеб. пособие для студ. учреждений высш. образования по химико-фармацевтическим спец. / Н.В. Логинова, Г.И. Полозов. -2-е изд. перераб. и доп. – Минск : БГУ, 2012.

2. Лемешевский В.О., Остренко К.С. Общая фармакология (основы фармакокинетики и фармакодинамики. Фармакоэкономика. Доказательная медицина). Учебное пособие. – Минск : БГУ. – 2024.

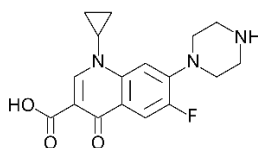
Раздел 4. Учебная дисциплина «Строение вещества»

Ситуационные задания

1. База данных химических соединений содержит следующую информацию о 182 химических веществах: ChemSpider ID, молярная масса,

показатель преломления, площадь полярной поверхности, температура кипения, максимальная суточная доза в качестве действующего вещества лекарственного средства. Опишите алгоритм построения линейных моделей, отражающих зависимость максимальной суточной дозы от каждого из дескрипторов и критерии выбора наилучшей линейной модели. Опишите, как можно использовать полученную модель для предсказания максимальной суточной дозы вещества, не входящего в базу данных, но имеющего известные значения дескрипторов.

2. Предложите набор дескрипторов для описания структуры молекулы ципрофлоксацина (приведена на рисунке), пригодных для построения модели предсказания его фармакологической активности.



Практические задания

3. Проанализируйте, какие типы фундаментальных взаимодействий реализуются между элементарными частицами в атоме водорода. Оцените с теоретической точки зрения, будет ли гравитационное взаимодействие вносить существенный вклад в удержании электрона в атоме водорода. Подтвердите свой ответ расчетом, сравнив силу гравитационного и электромагнитного взаимодействия между ядром и электроном в атоме водорода.

Справочные данные: $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ кг, $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31}$ кг, $e = 1,66 \cdot 10^{-19}$ Кл, радиус первой боровской орбиты $r = 5,29 \cdot 10^{-11}$ м, гравитационная постоянная $G = 6,67 \cdot 10^{-11}$ Н·м²/кг², постоянная Кулона $k = 9 \cdot 10^{-9}$ Н·м²/кг²; $F_k = k \cdot |q_1| \cdot |q_2| / r^2$; $F_r = G \cdot m_1 \cdot m_2 / r^2$.

Решение

Основными типами фундаментальных взаимодействий, реализующимися между элементарными частицами в атоме водорода, являются электромагнитные взаимодействия (между отрицательно заряженным электроном и положительно заряженным ядром, состоящим из положительно заряженных протонов и незаряженных нейтронов) и сильные взаимодействия, удерживающие нуклоны (протоны и нейтроны) в ядре. Гравитационные и слабые взаимодействия менее существенны в данном случае. Теоретически, гравитационное взаимодействие существенного вклада в удержание электрона в атоме водорода вносить не будет из-за небольших масс электрона и ядра, поскольку сила гравитационного взаимодействия прямо пропорциональна массе взаимодействующих частиц. Следовательно, основным типом взаимодействия, ответственным за удержание электрона в атоме, будет электромагнитное взаимодействие. Подтвердим это расчетом. Определим силы гравитационного и кулоновского взаимодействия:

$$F_r = G \cdot m_e \cdot m_p / r^2 = 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ Н} \cdot \text{м}^2 / \text{кг}^2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ кг} / (5,29 \cdot 10^{-11})^2 \text{ м}^2 = 3,63 \cdot 10^{-47} \text{ Н};$$

$$F_k = k \cdot |q_e| \cdot |q_p| / r^2 = 9 \cdot 10^9 \text{ Н} \cdot \text{м}^2 / \text{кг}^2 \cdot |-1,66 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}| \cdot 1,66 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} / (5,29 \cdot 10^{-11})^2 \text{ м}^2 = 8,86 \cdot 10^8 \text{ Н}.$$

Расчет указывает на то, что вклад электромагнитного взаимодействия значительно превышает вклад гравитационного взаимодействия.

4. Бензойная кислота $\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ при стандартных условиях представляет собой твердое кристаллическое вещество белого цвета. Это соединение используется в качестве теплового стандарта для калибровки калориметров, поскольку значения теплоты кристаллизации и плавления бензойной кислоты известны с высокой точностью и легко воспроизводимы. Температура плавления бензойной кислоты составляет 122°C , температура кипения 249°C , энтальпия плавления $18,01 \text{ кДж/моль}$, энтальпия испарения $78,9 \text{ кДж/моль}$, теплоемкость в жидком состоянии $259,0 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$, теплоемкость в твердом состоянии $146,7 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$, теплоемкость в газообразном состоянии $172,3 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$. Схематично изобразите график зависимости температуры бензойной кислоты от сообщаемой веществу теплоты. Объясните, при каких значениях температуры и почему на таком графике должны наблюдаться горизонтальные участки (плато). Рассчитайте количество теплоты (кДж), необходимое для нагревания 2025 г бензойной кислоты от 25°C до 270°C .

Литература

1. Строение и состояния вещества: Учебное пособие / Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. – СПб.: Издательство «Лань», 2021. – 236 с.
2. Частицы и атомные ядра: Учебник / Ишханов Б.С., Капитонов И.М., Юдин Н.П. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2017. – 584 с.
3. Основы физической химии: Учебник в 2-х частях / Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. – 5-е изд., перераб. и доп. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2019. – 348 с.
4. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко ; Национальная академия наук Беларуси, Институт биоорганической химии. – Минск : Беларуская навука, 2023. – 137 с.