ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТІРЛІГІ
ӘЛ-ФАРАБИ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

Фармацевтикалық үдерістердің термодинамикасы мен кинетикасын зерттеудің заманауи физикалық-химиялық әдістері

Химия және химиялық технология факультеті, Физикалық химия, катализ және мұнайхимия кафедрасының оқытушысы

PhD Савденбекова Б.Е.

Алматы, 2026

Дәрістің мақсаты

Фармацевтикалық үдерістердің термодинамикалық және кинетикалық сипаттамаларын зерттеуде қолданылатын заманауи физика-химиялық әдістердің теориялық негіздерін түсіндіру; UV–Vis спектрофотометрия, жоғары тиімді сұйықтықтық хроматография (HPLC), инфрақызыл спектроскопия (FTIR), рентгендік дифракция (XRD) әдістерінің жұмыс істеу принциптерімен, аспаптық құрылғыларымен және фармацевтикалық зерттеулердегі қолданылу бағыттарымен таныстыру.

Бақылау сұрақтары

1. Фармацевтикалық үдерістерді зерттеуде қолданылатын заманауи физика-химиялық әдістерді сипаттаңыз. Олардың зерттеу нысаны мен анықтайтын параметрлерін түсіндіріңіз.
2. UV–Vis спектрофотометрия әдісінің жұмыс істеу принципін түсіндіріңіз. Абсорбция мен концентрация арасындағы байланысты және калибрлеу графигінің маңызын көрсетіңіз.
3. HPLC және FTIR әдістерінің жұмыс істеу принциптерін салыстырыңыз. Олардың дәрілік заттардың химиялық құрамын, тазалығын және молекулааралық әрекеттесуін зерттеудегі қолданылуын сипаттаңыз.
4. Рентгендік дифракция (XRD) әдісінің фармацевтикалық зерттеулердегі маңызын түсіндіріңіз. Оның көмегімен дәрілік заттардың кристалдық құрылымы мен полиморфтық түрлерін анықтау принципін сипаттаңыз

Жоспар

- Фармацевтикалық зерттеулердегі физика-химиялық талдау әдістерінің маңызы.
- UV–Vis спектрофотометрия: теориялық негізі, жұмыс принципі және аспаптық құрылымы.
- Жоғары тиімді сұйықтықтық хроматография (HPLC): бөлу механизмі және құрылғының негізгі бөліктері.
- Инфрақызыл спектроскопия (FTIR): молекулалық тербелістер және функционалдық топтарды анықтау.
- Рентгендік дифракция (XRD): кристалдық құрылымды зерттеудің теориялық негізі.
- Әдістердің фармацевтикалық үдерістердің кинетикасы мен термодинамикасын зерттеудегі қолданылуы.
- Физика-химиялық әдістердің салыстырмалы сипаттамасы және нәтижелерді кешенді интерпретациялау.

Фармацевтикалық зерттеулердегі физика-химиялық әдістері

Зерттеудің негізгі бағыттары:

- Дәрілік заттың концентрациясын және сандық құрамын анықтау.
- Белсенді фармацевтикалық ингредиенттің химиялық құрылымын сәйкестендіру.
- Қоспалар мен ыдырау өнімдерін анықтау.
- Заттың кристалдық және аморфты күйін зерттеу.
- Дәрілік қалыптың тұрақтылығы мен босап шығу кинетикасын бағалау.

Төрт негізгі әдістің зерттеу нысаны:

Әдіс	Негізгі зерттеу нысаны
UV–Vis	Жарық жұтылуы және зат концентрациясы
HPLC	Қоспа компоненттерін бөлу және сандық анықтау
FTIR	Молекулалық құрылым және функционалдық топтар
XRD	Кристалдық құрылым және фазалық құрам





Жоғары тиімді сұйықтықтық хроматография (HPLC)

Теориялық негізі. HPLC — қоспа құрамындағы заттарды қозғалмалы және қозғалмайтын фазалар арасындағы әртүрлі әрекеттесуіне байланысты бөлу әдісі. Сұйық қозғалмалы фаза жоғары қысыммен хроматографиялық колонка арқылы өткізіледі.

Негізгі хроматографиялық көрсеткіштер:

- Ұсталу уақыты (t_R) — компоненттің детекторға жету уақыты.
- Пик ауданы — зат мөлшерін сандық бағалау үшін қолданылатын сигнал.
- Пик биіктігі — компоненттің детектор жауабының қарқындылығын сипаттайды.

Фармацевтикалық қолданылуы:

- Дәрілік препараттардың сандық және сапалық талдауы.
- Белсенді ингредиент пен қоспаларды бөлу.
- Ылдырау өнімдерін анықтау.
- Дәрілік заттардың тұрақтылығын зерттеу.
- Фармацевтикалық препараттардың тазалығын бағалау.



UV–Vis спектрофотометрия: жұмыс принципі және аспаптық құрылымь

2-бет. UV–Vis спектрофотометрия: жұмыс принципі және аспаптық құрылымы

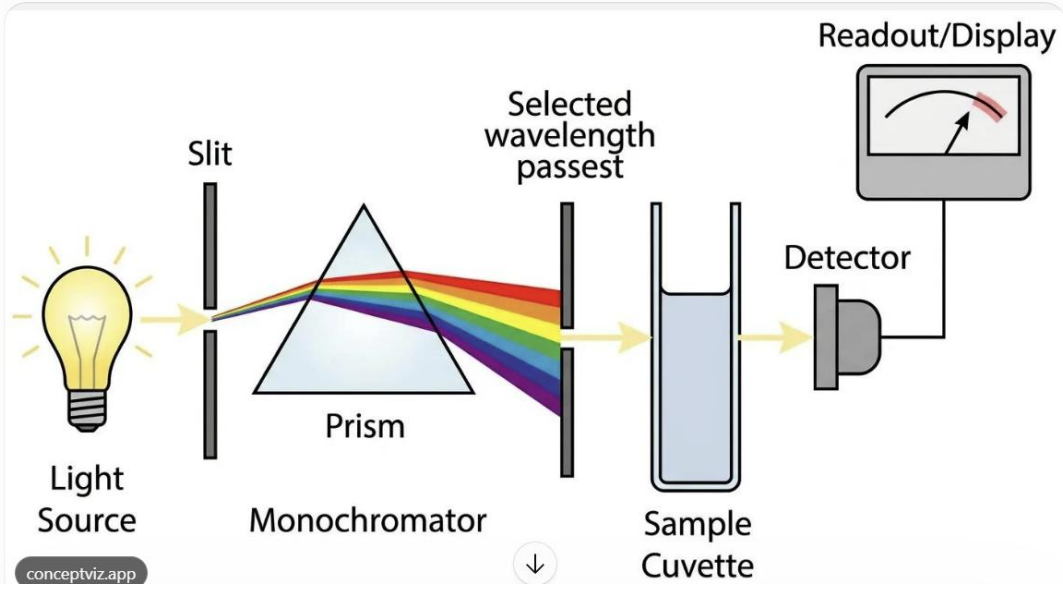
Теориялық негізі. UV–Vis спектрофотометрия зат молекулаларының ультракүлгін және көрінетін аймақтағы электромагниттік сәулені жұтуына негізделген. Жарық энергиясын жұту нәтижесінде молекуладағы электрондар төменгі энергетикалық деңгейден жоғары энергетикалық деңгейге ауысады.

Әдістің негізгі сандық заңы — Бугер–Ламберт–Бер заңы: $A = \varepsilon \cdot l \cdot C$

Мұндағы:

- A — оптикалық тығыздық;
- ε — молярлық жұту коэффициенті;
- l — оптикалық жол ұзындығы;
- C — ерітінді концентрациясы.

Аспаптың негізгі бөліктері:





Инфрақызыл спектроскопия (FTIR)

Теориялық негізі. FTIR спектроскопиясы молекулалардағы химиялық байланыстардың инфрақызыл сәулені жұтуына негізделген. Сәуле жұтылған кезде молекулалар тербелмелі энергия деңгейлері арасында ауысады. Әрбір функционалдық топқа тән тербеліс жиіліктері болады, сондықтан ИҚ-спектр заттың химиялық құрылымы туралы ақпарат береді.

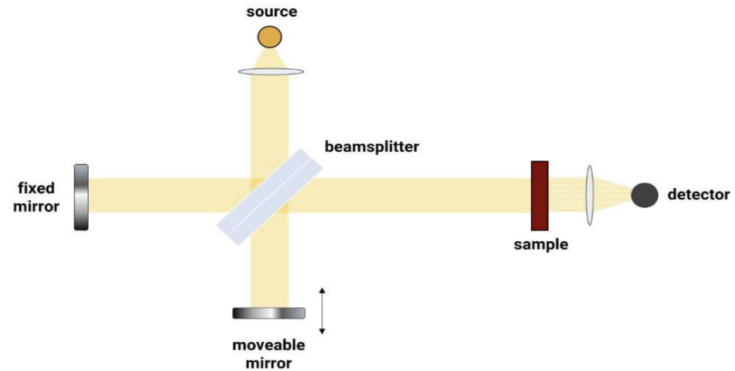
ИҚ-спектрдің негізгі аймақтары:

- 4000–2500 $см^{-1}$ — O–H, N–H және C–H байланыстарының тербелістері.
- 2500–2000 $см^{-1}$ — үштік байланыстардың тербелістері.
- 2000–1500 $см^{-1}$ — C=O және C=C байланыстарының тербелістері.
- 1500–400 $см^{-1}$ — «саусақ ізі» аймағы, молекулаға тән күрделі тербелістер.



Фармацевтикалық қолданылуы:

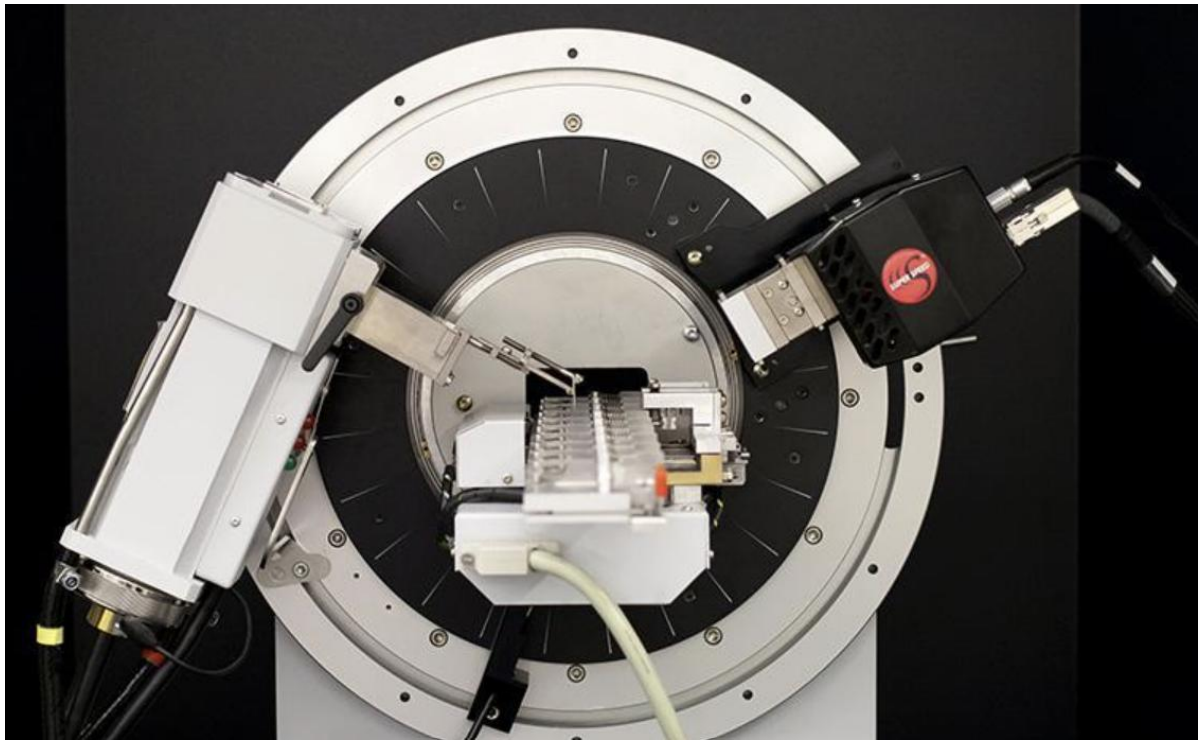
- Дәрілік заттардың функционалдық топтарын анықтау.
- Бастапқы зат пен алынған өнімнің құрылымдық сәйкестігін салыстыру.
- Полимер мен белсенді фармацевтикалық ингредиент арасындағы ықтимал әрекеттесулерді зерттеу.
- Химиялық модификация және деградация белгілерін анықтау.



Рентгендік дифракция (XRD): кристалдық құрылымды зерттеу

Теориялық негізі. XRD әдісі кристалдық материалдардағы атомдық жазықтықтардан рентген сәулелерінің дифракциялануына негізделген. Дифракциялық максимумдар кристалдық тордың геометриялық ерекшеліктері мен фазалық құрамын анықтауға мүмкіндік береді.

Әдістің теориялық негізін Брэгг заңы сипаттайды: $$n\lambda = 2d\sin\theta$$



Мұндағы:

- n — дифракция реті;
- λ — рентген сәулесінің толқын ұзындығы;
- d — кристалл жазықтықтары арасындағы қашықтық;
- θ — түсу бұрышы.

Фармацевтикалық қолданылуы:

- Дәрілік заттардың кристалдық және аморфты күйін анықтау.
- Полиморфтық модификацияларды ажырату.
- Кристалдық фазалардың құрамын зерттеу.
- Ұнтақтардың кристалдық құрылымындағы өзгерістерді бақылау.
- Дәрілік зат пен қосымша заттар арасындағы к[illegible] күйдегі өзгерістерді бағалау.

Физика-химиялық әдістерді салыстыру және зерттеу нәтижелерін кешенді бағалау

Негізгі әдістердің салыстырмалы сипаттамасы

Сипаттамасы	UV–Vis	HPLC	FTIR	XRD
Физикалық негізі	Жарық жұту	Хроматографиялық бөлу	ИҚ-сәулені жұту	Рентген дифракциясы
Негізгі ақпарат	Концентрация	Компоненттер құрамы	Химиялық байланыстар	Кристалдық құрылым
Нәтиже түрі	Абсорбциялық спектр	Хроматограмма	ИҚ-спектр	Дифрактограмма
Негізгі қолданылуы	Сандық талдау	Сапалық және сандық талдау	Құрылымды сәйкестендіру	Фазалық талдау

Зерттелетін фармацевтикалық үлгі

Дәрілік зат, таблетка, капсула немесе полимерлік жүйе

↓

UV–Vis

Концентрацияны анықтау

HPLC

Құрам мен тазалықты анықтау

FTIR

Химиялық құрылымды зерттеу

XRD

Кристалдық күйді анықтау

Пайдаланған әдебиеттер тізімі

1. Физикалық химия (химиялық кинетика және электрохимия): оқулық / Ә.Қ. Оспанова, Г.А. Сейілханова; Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2023. - 243, [1] б. - ISBN 978-601 04-6459-9 :
2. Оспанова, Әлия Қапанқызы. Физикалық химияның теориялары мен мәселелері : оқу құралы / Ә. Қ. Оспанова, Г. Х. Шәбікова, Л. И. Сыздықова ; Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2021. - 188, [1] б. - ISBN 978-601-04-5546-7 :
3. Физикалық химия пәні бойынша есептер. (Химиялық кинетика және электрохимия) : оқулық / Г. Х. Шабікова, Ә. Қ. Оспанова, Н. С. Ашимхан ; ҚР Білім және ғылым м-гі, Әл-Фараби атын. ҚазҰУ. - Алматы : Қазақ ун-ті, 2016. - 285
4. Физикалық химия : оқулық / С.Х. Хұсайын ; ҚР Білім және ғылым м-гі, Қ.И. Сәтбаев атын. ҚазҰТУ. - Алматы : ҚазҰТУ, 2014. - 403, [1] б. : сур. - Библиогр.: 355-356 б. - ISBN 978-601-228 643-4