

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.



20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Биокоординационная химия Б1.В.ДВ.6

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Улахович Н.А.

Рецензент(ы):

Девятов Ф.В.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 71516

Казань

2016

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Улахович Н.А. Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Nikolay.Ulakhovich@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

формирование у студентов понятий о теоретических основах этой дисциплины, ее особенностях, связи с другими науками и ее практической значимости. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы современные представления о разнообразных координационных соединениях с многочисленными биолигандами живого организма, о биометаллах как "организаторах" жизни. На основе полученных теоретических знаний обучающиеся должны иметь представление о применении результатов биокоординационной химии в медицине, диагностике заболеваний, фармакологии.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ДВ.6 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина "Биокоординационная химия" относится к дисциплинам по выбору учебного цикла СЗ. Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов базовой части цикла СЗ "Неорганическая химия" (химия элементов, окислительно-восстановительные реакции, координационные соединения), "Органическая химия", "Физическая химия". Полученные при освоении дисциплины знания и умения облегчают освоение дисциплин "Химические основы биологических процессов", "Координационные соединения", "Биогеохимия" и других курсов по выбору.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях
ПК-2 (профессиональные компетенции)	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

на молекулярном уровне механизм взаимодействия биометаллов с биолигандами, а также общие закономерности реакция комплексообразования.

2. должен уметь:

моделировать биологические и биохимические процессы с участием координационных соединений.

3. должен владеть:

навыками применения результатов биокоординационной химии в токсикологии, медицине, диагностике заболеваний и создании новых лекарственных препаратов

применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-3).

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение в биокоординационную химию. Связь биокоординационной химии с бионеорганической и биоорганической химией.	1	1	2	0	0	домашнее задание
2.	Тема 2. Понятие о координационных соединениях. Координационный полиэдр. Координационные числа, конфигурации и примеры биокмлексообразователей.	1	2	2	0	0	домашнее задание
3.	Тема 3. Координационные соединения с порфиринами. Металлопорфирины (гемоглобин и хлорофилл).	1	3	2	0	0	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Координационная химия гемоглобина и миоглобина. Геометрия комплексов. Спиновое состояние.	1	4	2	0	0	домашнее задание
5.	Тема 5. Связь кислород-железо. Ориентация кислорода относительно гема. □-Дативная связь железо-кислород в оксигенированном гемоглобине. Интерактивный опрос.	1	5	2	0	0	домашнее задание
6.	Тема 6. Роль аминокислотных остатков белка в окружении гема. Влияние конформаций белковой части гемоглобина и миоглобина. Функциональное значение конформационных изменений.	1	6	0	2	0	домашнее задание
7.	Тема 7. Цитохромы b и c. Первичная структура. Лигандные группы. Полная структура цитохрома c.	1	7	0	2	0	домашнее задание
8.	Тема 8. Клеточное окисление. Схема процесса. Роль цитохромов c, a и a3. Другие цитохромы.	1	8	0	2	0	домашнее задание
9.	Тема 9. Макрогетероциклические пигменты, участвующие в процессе фотосинтеза (хлорофиллы). Координационные свойства магния в хлорофилле.	1	9	0	2	0	тестирование

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
10.	Тема 10. Круглый стол ?Координационные соединения металлов в живых организмах. Ферропротопорфирины?	1	10	0	2	0	домашнее задание
11.	Тема 11. Корриноиды. Структура. Состояние окисления кобальта. Свойства, определяемые кобальтом и аксиальными лигандами. Цис- и транс-эффекты.	1	11	0	2	0	домашнее задание
12.	Тема 12. Биокоординационная химия меди. Медьсодержащие белки (гемоцианин, пластоцианин). Цитохромоксидаза. Состав. Простетические группы.	1	12	0	2	0	домашнее задание
13.	Тема 13. Биокоординационная химия цинка. Молекулярная структура и геометрия координации цинка (П) с карбоксипептидазой.	1	13	0	2	0	домашнее задание
14.	Тема 14. Связь между координацией иона металла и пептидазной активностью в карбоксипептидазе.	1	14	0	2	0	домашнее задание
	Тема . Итоговая форма контроля	1		0	0	0	зачет
	Итого			10	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение в биокоординационную химию. Связь биокоординационной химии с бионеорганической и биоорганической химией.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Биокоординационная химия (БКХ) находится на границе между биорганической и бионеорганической химии. В задачи БКХ входит: изучение на молекулярном уровне взаимодействия металлов с биолигандами, моделирование биологических и биохимических процессов, использование результатов БКХ в медицине, создание новых препаратов и установление механизма их действия. Применение координационных соединений в качестве лекарственных препаратов. Причины биологической активности координационных соединений. Металлсодержащие антибиотики. Макро- и микроэлементы. Биометаллы и биолиганды. Содержание микроэлементов в живых организмах.

Тема 2. Понятие о координационных соединениях. Координационный полиэдр. Координационные числа, конфигурации и примеры биокомплексообразователей.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Определение координационного соединения. Центральный атом (комплексобразователь) ? акцептор, лиганды ? доноры электронов. При образовании координационного соединения возникает донорно-акцепторная связь. Координационное соединение может быть электронейтральным, иметь положительный заряд (комплексный катион) или отрицательный (комплексный анион). Ступенчатая диссоциация лигандов. Координационные полиэдры. Хиральность. Классификация координационных соединений (по типу центрального атома, по заряду центрального атома, по типу координируемых лигандов, по характеру связывания). Важнейшие типы биокомплексов. Общие характеристики биокомплексов.

Тема 3. Координационные соединения с порфиринами. Металлопорфирины (гемоглобин и хлорофилл).

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Порфириновые соединения и их лиганды. Структура порфиринов из природных гемов. Влияние структуры порфиринов на их свойства. Важнейшим свойством порфиринов является наличие в молекуле координационной полости, ограниченной атомами азота (N₄). Образование ферропротопорфирина (гема), который представляет собой плоский цикл (макроцикл). Гемоглобин ? это продукт присоединения гема к особому белку (глобину). Порфириновый цикл содержит также хлорофилл ? координационное соединение магния. Отличие гема от хлорофилла. Виды хлорофилла. Кроме типичных для порфирина четырех пиррольных колец в структуру входит пятый цикл, содержащий атом водорода, карбонильную группу и карбометоксильную группу.

Тема 4. Координационная химия гемоглобина и миоглобина. Геометрия комплексов. Спиновое состояние.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Железопорфириновые комплексы гемоглобина и миоглобина с лигандами в шестом координационном положении в первом приближении имеют октаэдрическую конфигурацию. Остаток гистидина и кислород или другой шестой лиганд занимают аксиальное положение. Влияние π-взаимодействия на величину расщепления уровней в гемоглобине и миоглобине. При отсутствии кислорода атом Fe(II) в гемоглобине имеет координационное число 5, связан донорно-акцепторной связью с четырьмя координирующими атомами азота протопорфирина и одной менее прочной связью с третичным атомом азота проксимального имидазольного фрагмента гистидина. Координационный узел Fe(N)₄NIm представляет собой квадратную пирамиду с атомом железа, удаленным от основания пирамиды на 0.05 ? 0.08 нм. Шестое координационное место не в состоянии занять ни один имеющийся поблизости лиганд, кроме молекулярного кислорода.

Тема 5. Связь кислород-железо. Ориентация кислорода относительно гема. π-Дативная связь железо-кислород в оксигенированном гемоглобине. Интерактивный опрос.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Молекула O₂ вызывает оксигенирование гемоглобина иона железа(II). При этом комплекс Fe(N)4N_{lm} из высокоспинового пирамидального состояния переходит в низкоспиновое октаэдрическое искаженное состояние с координационным узлом Ft(N)4N_{lm}(O₂). Под влиянием кристаллического поля лигандов (lm и O₂) t_{2g} e_{2g} - конфигурации Fe(II) превращается в t_{62g}e_{0g}. На вакантные e_g - орбитали переходят сигма-электронные пары имидазола и кислорода. Молекула O₂ связывается в шестом координационном месте с Fe(II) также за счет дативной π-связи. Координированный ион железа предоставляет пару электронов, находящуюся на его d_{xz} (или d_{xz})-орбитали, на вакантную (разрыхляющую) p_z-орбиталь молекулы кислорода.

Тема 6. Роль аминокислотных остатков белка в окружении гема. Влияние конформаций белковой части гемоглобина и миоглобина. Функциональное значение конформационных изменений.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Аминокислотные остатки, расположенные вблизи активного центра (в шестом координационном положении гема), обеспечивают гидрофобное окружение этого центра, ограничивают объем и обеспечивают должную ориентацию лиганда при взаимодействии с гемосодержащими белками. Замещение лиганда в шестом координационном положении должно вызвать структурные изменения в миоглобине. Атом железа был зафиксирован примерно на расстоянии 0.3 Å над плоскостью порфиринового кольца со стороны проксимального гистидина. Относительная независимость спинового состояния комплекса в миоглобине от положения железа над плоскостью гема вызвана влиянием белка-глобина. Различия в химических сдвигах у дезоксимиоглобина и оксимиоглобина свидетельствуют о том, что имеются небольшие изменения в положении отдельных атомов у различных алифатических и ароматических аминокислотных остатков в области, расположенной вблизи гема. В отличие от миоглобина физиологические функции гемоглобина, заключающиеся в эффективном потреблении и расходовании кислорода, делают необходимым наличие у этого белка кооперативного характера и процесса связывания кислорода и механизма изменения сродства к кислороду.

Тема 7. Цитохромы b и c. Первичная структура. Лигандные группы. Полная структура цитохрома c.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Железопорфирины разных типов, соединяясь с белками, дают начало группе хромопротеидов, объединенных под общим названием цитохромы (?цитохром? означает клеточная окраска). Важным этапом обмена вещества (метаболизма) является отщепление от пищевых веществ водорода, которые переходят в ионное состояние, а освобожденные электроны поступают в дыхательную цепь. В этой цепи, переходя от одного соединения к другому, они отдают свою энергию на образование богатых энергией молекул аденозинтрифосфорной кислоты, а сами присоединяются к молекуле кислорода. Цитохромы обычно делят на три класса a, b, c. Цитохром c. В этом соединении порфириновое кольцо, содержащее железо(II) в центре, связано с белком за счет ковалентных связей атомов кольца с остатком цистеина в молекуле белка. С кислородом цитохром c не реагирует, поскольку у него шестое координационное место занято аминокислотным остатком метионина только они окисляются молекулярным кислородом.

Тема 8. Клеточное окисление. Схема процесса. Роль цитохромов c, a и a₃. Другие цитохромы.

практическое занятие (2 часа(ов)):

В цепи переноса электронов цитохром c передает электроны цитохромам a и a₃. Из всех цитохромов только они окисляются молекулярным кислородом. Эта система завершает цепь цитохромов и носит название цитохромоксидазы, которая представляет собой сложный белковый комплекс, содержащий два атома меди и две молекулы уникального гема A. Молекула цитохромоксидазы обладает внутренней симметрией, имея реакционный центр, к которому ферроцитохром доставляет электроны и к которому присоединяется молекула кислорода. Этот центр включает как гемы, так и атомы меди. В цитохромоксидазе центр представляет биядерный комплекс, в котором два атома меди связаны через бидентатный остаток цистеина. Каждый атом меди координирует гетероциклический атом азота имидазола.

Тема 9. Макрогетероциклические пигменты, участвующие в процессе фотосинтеза (хлорофиллы). Координационные свойства магния в хлорофилле.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Хлорофиллы ? это группа пигментов, содержащихся в живых организмах, способных к фотосинтезу. Они распространены в растениях. Эти вещества сильно поглощают свет. Действуют как фоторецепторы на начальных стадиях превращения световой энергии в процессе фотосинтеза. Число хлорофиллов в природе невелико. Наиболее широко распространенным представителем этого класса пигментов является хлорофилл а. Он найден во всех растениях, образующих кислород в процессе фотосинтеза. Хлорофилл является существенной частью биологического аппарата для использования энергии света. Все хлорофиллы, участвующие в фотосинтезе, являются координационными соединениями магния. В то время как порфирины, функционирующие как простетические группы гемоглобинов, цитохромов, каталаз и пероксидаз, представляет собой комплексы переходных металлов, хлорофиллы содержат ион одного и того же металла ? магния. Характерным свойством хлорофилла является его способность образовывать донорно-акцепторные комплексы как за счет самоконденсаций, так и за счет взаимодействия с посторонними донорами или лигандами.

Тема 10. Круглый стол ?Координационные соединения металлов в живых организмах. Ферропротопорфирины?.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Электронная структура и реакционная способность биоккомплексов металлов. Общие характеристики биоккомплексов и их классификация. Сидерохромы ? транспортные формы железа. Комплексы щелочных металлов ? ионофоры. Модели ионофоров и синтетические макроциклические лиганды. Металлопротеины. Модели металлоферментов. Характер действия ионов металлов и анионов на каталитическую активность ферментов. Типы взаимодействия фермента с ионами металла и лигандом. Активирующее влияние катионов металлов.

Тема 11. Корриноиды. Структура. Состояние окисления кобальта. Свойства, определяемые кобальтом и аксиальными лигандами. Цис- и транс-эффекты.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Биологический синтез и распад корриноидов. Витамин В12 (цианкобаламин) и кофермент витамина В12 (аденозилкобаламин). Основные химические свойства. Ион кобальта(II) помещается в центре корринового цикла, похожего на порфириновый. Комплекс витамина В12 содержит два пиррольных цикла соединены непосредственно друг с другом, а другая пара пиррольных ядер соединена через группу СН, т.е. так, как у порфириновых колец. Октаэдрическая координация кобальта в корриноидах. Искажения октаэдра в структуре кофермента. Влияние аксиальных лигандов на свойства корриноидов кобальта. Цис- и транс-влияние аксиальных лигандов на термодинамические параметры и на кинетику процессов с участием корриноидов кобальта. Кобальт(II) и кобальт(I) корриноиды. В природном коферменте вместо CN- группы содержится остаток дезоксиаденозина. Участие метилкобаламина в процессах метилирования.

Тема 12. Биокоординационная химия меди. Медьсодержащие белки (гемоцианин, пластоцианин). Цитохромоксидаза. Состав. Простетические группы.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Координационное соединение меди(II) (гемоцианин) участвует в переносе кислорода и электронов. Строение координационного узла гемоцианина. В дезоксигемоцианине атом меди(II) имеет координационное число 3 и пирамидально координирует три остатка гистидина. После присоединения молекула кислорода образует две мостиковые связи, соединяющие два атома меди. Остатки белка значительно сближаются. Атомы меди при этом становятся пятикоординированными. Переносчиками электронов являются также медные белки, содержащие медь(I), остатки тиолатных групп, имидазол и цистеин (платоцианин). В платоцианине присутствует плоский комплекс меди(I) с координационным числом 3. При координации четвертого лиганда (содержащего донорный атом серы) координационное число меди повышается до 4, а координационное соединение преобразуется в тетраэдр. В цитохромоксидазе центр фермента представляет биядерный комплекс, в котором два атома меди связаны через бидентатный остаток цистеина, причем каждый атом меди координирует гетероциклический атом азота имидазола. При одноэлектронном окислении этой формы образуется парамагнитный комплекс, в котором неспаренный электрон принадлежит обоим атомам меди.

Тема 13. Биокоординационная химия цинка. Молекулярная структура и геометрия координации цинка (II) с карбоксипептидазой.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Ионы цинка образуют координационные соединения с лигандами, содержащими донорные атомы кислорода и азота. Цинк входит в состав активного центра многих важных ферментов (карбангидраза, карбоксипептидаза, алкогольдегидрогеназа). Строение активного центра карбоксипептидазы. Активный центр содержит большое число аминокислотных остатков. Ион цинка связан с двумя остатками гистидина и глутаминовой кислоты. Активный центр фермента затрагивает четверть всей молекулы и включает ион цинка(II) и его лиганды, карман, заключающий в себя активный центр, канал связывания субстрата и прилегающие обрести. Длины связей металл-лиганд координационного центра карбоксипептидазы сопоставимы с длинами связей для комплексов цинка с аминокислотами. Геометрия координации цинка близка к тетраэдрической.

Тема 14. Связь между координацией иона металла и пептидазной активностью в карбоксипептидазе.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Роль ионов цинка(II) в механизме гидролиза пептидов под действием карбоксипептидазы. Цинк-гидроксильный и цинк-карбонильный механизмы. Влияние замещения цинка в карбоксипептидазе на другие металлы. Меньшая специфичность иона металла по сравнению с гемовыми структурами. Структура кристаллического фермента. Взаимосвязь между координационным окружением и d-электронной конфигурацией металла и пептидазной активностью. Координация иона металла в карбоксипептидазе с атомом кислорода карбонильной группы субстрата поляризует связь C=O карбонильной группы.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение в биокоординационную химию. Связь биокоординационной химии с бионеорганической и биоорганической химией.	1	1	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Понятие о координационных соединениях. Координационный полиэдр. Координационные числа, конфигурации и примеры биоконформационных комплексов.	1	2	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
3.	Тема 3. Координационные соединения с порфиринами. Металлопорфирины (гемоглобин и хлорофилл).	1	3	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
4.	Тема 4. Координационная химия гемоглобина и миоглобина. Геометрия комплексов. Спиновое состояние.	1	4	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
5.	Тема 5. Связь кислород-железо. Ориентация кислорода относительно гема. π -Дативная связь железо-кислород в оксигенированном гемоглобине. Интерактивный опрос.	1	5	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
6.	Тема 6. Роль аминокислотных остатков белка в окружении гема. Влияние конформаций белковой части гемоглобина и миоглобина. Функциональное значение конформационных изменений.	1	6	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
7.	Тема 7. Цитохромы b и c. Первичная структура. Лигандные группы. Полная структура цитохрома c.	1	7	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
8.	Тема 8. Клеточное окисление. Схема процесса. Роль цитохромов с, а и а3. Другие цитохромы.	1	8	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
9.	Тема 9. Макрогетероциклические пигменты, участвующие в процессе фотосинтеза (хлорофиллы). Координационные свойства магния в хлорофилле.	1	9	подготовка к тестированию	2	тестирование
10.	Тема 10. Круглый стол ?Координационные соединения металлов в живых организмах. Ферропротопорфирины?.	1	10	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
11.	Тема 11. Корриноиды. Структура. Состояние окисления кобальта. Свойства, определяемые кобальтом и аксиальными лигандами. Цис- и транс-эффекты.	1	11	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
12.	Тема 12. Биокоординационная химия меди. Медьсодержащие белки (гемоцианин, пластоцианин). Цитохромоксидаза. Состав. Простетические группы.	1	12	подготовка домашнего задания	6	домашнее задание
13.	Тема 13. Биокоординационная химия цинка. Молекулярная структура и геометрия координации цинка (II) с карбоксипептидазой.	1	13	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
14.	Тема 14. Связь между координацией иона металла и пептидазной активностью в карбоксипептидазе.	1	14	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- компьютерные презентации лекций;
- интерактивный опрос по разделам 1-4
- интерактивный опрос по разделам 10-13;
- контрольная работа 1;
- контрольная работа 2;

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Введение в биокоординационную химию. Связь биокоординационной химии с бионеорганической и биоорганической химией.

домашнее задание , примерные вопросы:

Современные проблемы биокоординационной химии.

Тема 2. Понятие о координационных соединениях. Координационный полиэдр. Координационные числа, конфигурации и примеры биоконплексообразователей.

домашнее задание , примерные вопросы:

Типы координационных соединений с биологически активными лигандами.

Тема 3. Координационные соединения с порфиринами. Металлопорфирины (гемоглобин и хлорофилл).

домашнее задание , примерные вопросы:

Железо в живых организмах.

Тема 4. Координационная химия гемоглобина и миоглобина. Геометрия комплексов. Спиновое состояние.

домашнее задание , примерные вопросы:

Строение координационных соединений металлов с порфиринами и порфириноподобными веществами.

Тема 5. Связь кислород-железо. Ориентация кислорода относительно гема. π -Дативная связь железо-кислород в оксигенированном гемоглобине. Интерактивный опрос.

домашнее задание , примерные вопросы:

Природа химической связи в гемоглобине.

Тема 6. Роль аминокислотных остатков белка в окружении гема. Влияние конформаций белковой части гемоглобина и миоглобина. Функциональное значение конформационных изменений.

домашнее задание , примерные вопросы:

Конформационные изменения, вызываемые взаимодействием лигандов с гемоглобином.

Тема 7. Цитохромы b и c. Первичная структура. Лигандные группы. Полная структура цитохрома c.

домашнее задание , примерные вопросы:

Внутриклеточные окислительно-восстановительные катализаторы оксидоредуктаз.

Тема 8. Клеточное окисление. Схема процесса. Роль цитохромов c, a и a₃. Другие цитохромы.

домашнее задание , примерные вопросы:

Железо и медь в организмах; их роль в энергетике клетки.

Тема 9. Макрогетероциклические пигменты, участвующие в процессе фотосинтеза (хлорофиллы). Координационные свойства магния в хлорофилле.

тестирование , примерные вопросы:

. Магний и фотосинтез.

Тема 10. Круглый стол ?Координационные соединения металлов в живых организмах. Ферропротопорфирины?.

домашнее задание , примерные вопросы:

Металлы в живых организмах.

Тема 11. Корриноиды. Структура. Состояние окисления кобальта. Свойства, определяемые кобальтом и аксиальными лигандами. Цис- и транс-эффекты.

домашнее задание , примерные вопросы:

Многофункциональные ионы.

Тема 12. Биокоординационная химия меди. Медьсодержащие белки (гемоцианин, пластоцианин). Цитохромоксидаза. Состав. Простетические группы.

домашнее задание , примерные вопросы:

Медьсодержащие оксидазы и соответствующие им белки.

Тема 13. Биокоординационная химия цинка. Молекулярная структура и геометрия координации цинка (II) с карбоксипептидазой.

домашнее задание , примерные вопросы:

Ферменты и металлы. Типы взаимодействий ферментов с ионами металлов и лигандами.

Тема 14. Связь между координацией иона металла и пептидазной активностью в карбоксипептидазе.

домашнее задание , примерные вопросы:

Каталитическая активность и свойства иммобилизованных ферментов в присутствии ионов металлов.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Контрольные вопросы к самостоятельной работе студентов

1. Что называется координационным соединением?
2. Назовите биологически активные комплексообразователи.
3. В каких случаях реализуются полиэдры наивысшей симметрии?
4. Назовите биометаллы
5. Какие вы знаете биолиганды?
6. Какие вы знаете металлсодержащие белки?
7. Перечислите металлсодержащие ферменты.
8. Чем сидерофоры отличаются от ферритинов?
9. Какую роль в организме выполняет трансферрин?
10. Назовите типичные сидерофоры?
11. Какова степень окисления железа в миоглобине?
12. Почему железо (II) в дезоксигемоглобине выведено из плоскости порфиринового кольца?
13. Какое значение имеет плоскостное строение порфирина в реализации координационного узла?
14. Какова роль лиганда в пятом координационном положении в гемоглобине и миоглобине?
15. Каким образом координируется молекула кислорода относительно гема?
16. Какие связи реализуются в молекуле оксигемоглобина?
17. От чего зависит константа равновесия реакции присоединения кислорода к гему?
18. Что препятствует координации так называемых "посторонних" лигандов к гему?

19. Роль цитохромов в организме.
20. В какие реакции вступает цитохромоксидаза?
21. Координационные свойства магния в хлорофилле.
22. Электронодонорные и электроноакцепторные свойства хлорофилла.
23. Какая степень окисления кобальта реализуется в кобаламине?
24. Какой лиганд занимает шестое координационное место в структуре витамина В12?
25. Какие медьсодержащие белки вы знаете?
26. В состав активных центров каких ферментов входит цинк?
27. Координационные соединения каких элементов используют в качестве флуоресцентных меток для иммуноанализа? Привести примеры.
28. Какие лиганды используют для выведения радиоактивных элементов из организма?
29. Почему алюминий не относится к биометаллам?
30. Почему действие лекарственных препаратов, содержащих ионы металла, более эффективно, если металл связан в комплекс?

Примеры билетов к зачету

Билет 1

1. Структура гемоглобина. Координационный узел в окси- и дезоксигемоглобине.
2. Свойства корриноидов, определяемые центральным атомом.
3. Спектральные свойства цитохромоксидазы.
4. Геометрия координации цинка(II) в карбоксипептидазе.
5. Лекарственные формы на основе комплексов меди.

Билет 2

1. Влияние структуры порфиринов на их свойства.
2. Полная структура цитохрома с.
3. Электронодонорные и электроноакцепторные свойства хлорофилла.
4. Кобальт (II) корриноиды.
5. Лекарственные формы (координационные соединения) германия и олова.

Билет 3

1. Влияние выведения железа из плоскости порфиринового кольца.
2. Состав цитохромоксидазы.
3. Механизм биохимических реакций, проходящих с участием кофермента В12.
4. Хелаты металлов с флавохинонами.
5. Действие цисплатина на молекулу ДНК живой клетки.

Билет 4

1. Связывание лигандов с гемоглобином.
2. Образование карбоксигемоглобина. Константа равновесия реакции.
3. Особенности структуры витамина В12.
4. Цинксодержащие металлоферменты.
5. Лекарственные препараты, содержащие редкоземельные элементы.

Билет 5

1. Какое координационное число имеет железо(II) в дезоксигемоглобине?
2. Влияние ионов металлов на ДНК.
3. Цис- и транс-эффекты в кобальт(III)корриноидах.
4. Хелаты металлов с флавосемихинонами.
5. Металлы-зонды в биохимических исследованиях.

Билет 6

1. В чем заключается отличие сидерофоров от ферритинов?
2. Какова степень окисления железа в миоглобине и метгемоглобине? Схема координационного узла.
3. Какова роль кобаламинов в организмах?
4. Замещение цинка в карбоангидразе на ионы других металлов.
5. Строение и роль гемоцианина в организме.

Билет 7

1. Геометрия координационного узла в оксигемоглобине и гемоглобине.
2. Чем отличается макроциклическая система хлорофиллов от гемов.
3. Какова функция цитохрома с в организме?
4. В чем особенность пространственного строения рубредоксинов?
5. Почему в цис-изомере дихлородиамминплатины(II) возможно внутринитевое сшивание, а в транс-изомере нет?

Билет 8

1. За счет каких орбиталей железо(II) образует π -связь с молекулой кислорода?
2. Чем отличается метилкобаламин от витамина B12? Какова роль витамина B12 в организме?
3. Каковы условия образования кластеров в железосодержащих белках?
4. Какое пространственное строение имеет трансферрин?
5. Какова фармакологическая активность биядерных мостиковых комплексов?

Билет 9

1. В присутствии каких веществ образуется метгемоглобин?
2. Какие металлы содержатся в цитохромоксидазе?
3. Чем отличается корриновая кольцевая система от порфириновой? Для комплексов каких металлов она характерна?
4. Строение ферредоксина. Его роль в организме.
5. Какие вы знаете цинксодержащие ферменты? Координационное число цинка в них и тип полиэдра.

Билет 10

1. Как изменяется симметрия гема при оксигенировании?
2. Каково координационное число магния в хлорофилле?
3. Какие аминокислоты координируются с атомом железа(II) в трансферрине?
4. Какова степень окисления меди в пластоцианине?
5. Какой из d-металлов взаимодействует с гидроксильными группами рибозы и дезоксирибозы?

Билеты для контрольной работы

Билет 1

1. Какие соединения металлов могут быть интеркаляторами?
2. Строение координационного узла в пластоцианине.

Билет 2

1. Какие вы знаете дыхательные ферменты. Влияние ионов металлов.
2. Строение ферредоксинов. С какими аминокислотами координируется центральный атом в белках этого типа.

Билет 3

1. Какие вещества сохраняют железо в степени окисления +3? Резервы железа в организме.
2. Каким образом ионы металлов влияют на репликацию ДНК? Особенности нарушения репликации при одонитевом и двунитевом сшивании.

Билет 4

1. Какие координационные числа центрального атома реализуются в платоцианине в зависимости от условий протекания реакции комплексообразования?
2. Чем отличаются по химическому составу и структуре витамин В12 и его кофермент?

Билет 5

1. В чем сходство и различие порфиринов и хлорофиллов?
2. Последствия внутринитевого сшивания двойной спирали ДНК.

Билет 6

1. Каковы условия образования кластеров в железосодержащих белках?
2. Какие аминокислотные остатки полипептидной цепи белка образуют координационный узел в гемэритрине?

Билет 7

1. Почему действие лекарственных препаратов, содержащих ионы металла, более эффективно, если металл связан в комплекс?
2. Какое вещество выполняет роль переносчика кислорода в беспозвоночных?

Билет 8

1. Какие вещества в организме отвечают за доставку ионов железа(Ш) к клеткам, в которых происходит образование гемоглобина?
2. С какими центрами нуклеиновых кислот взаимодействуют ионы свинца?

Билет 9

1. В какой последовательности изменяется способность связывания ионов металлов с азотистыми гетероциклическими основаниями ДНК?
2. Степень окисления кобальта в кобаламинах.

Билет 10

1. Схема координации в оксигенированном гемоглобине. Геометрия координационного узла.
2. Назовите переносчики электронов среди белков. Какие металлы в них выполняют роль центрального атома? Укажите особенности координационного узла.

7.1. Основная литература:

Общая и неорганическая химия, Ч. 2. Химия элементов, Боос, Галина Арведовна, 2011г.

Общая и неорганическая химия, Ч. 1. Общая химия, Амиров, Рустэм Рафаэльевич, 2011г.

1. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости. - М.: Физматлит, 2010. - 384 с.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=2151

2. Метод УФ-спектроскопии и его применение в органической и физической химии [Текст: электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л. С. Якимова ; Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова, Каф. орган. химии .? Электронные данные (1 файл: 0,67 Мб) .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .? Загл. с экрана .? Для 2-го семестра .? Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2015 .? Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ .? <URL:http://libweb.kpfu.ru/ebooks/07-ICH/07_54_000903.pdf>.

7.2. Дополнительная литература:

1. Неорганическая биохимия / под ред. Г.Эйхгорна. - М.: Мир, 1978. - 736 с.

2. Киселев Ю.М. Химия координационных соединений / Ю.М.Киселев, Н.А.Добрынина. - М.: "Академия", 2007. - 352 с.

3. Березин Б.Д. Металлопорфирины / Б.Д.Березин, Н.С.Ениколопян. - М.: Наука, 1988. - 160 с.
4. Кнорре Д.Г. Биологическая химия / Д.Г.Кнорре, С.Д.Мызина. - М.: Высш.шк., 2002. - 479 с.
5. Будников Г.К., Евтюгин Г.А., Майстренко В.Н. Модифицированные электроды для вольтамперометрии в химии, биологии и медицине / "Лаборатория знаний", 2013, 416.
<http://e.lanbook.com/view/book/3159/>
6. Третьяков Ю.Д. Неорганическая химия. Химия элементов / Ю.Д.Третьяков, Л.И.Мартыненко, А.Н.Григорьев, А.Ю.Цивадзе. - М.: Изд-во МГУ, ИКЦ "Академкнига", 2007. - 537 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

Фёдоров М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии. Растворы и жидкости. ? М.: Физматлит, 2010. ? 384 с. -

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=2151

- 1.Бионеорганическая химия - www.chem.msu.su/rus/teaching/dobrinina/all.pdf
- 2.Основные направления исследований биокоординационных соединений в Бионеорганической химии - www.bsu.by/Cache/pdf/363423.pdf.
- 3.Бионеорганическая химия. Фонд знаний ?Ломоносов? - www.lomonosov-fund.ru/enc/ru/encyclopedia:01342:article
- 4.Взаимодействие металлов с биомолекулами - <http://biomolecula.ru/>
- 5.База данных. Химический каталог. Металлоферменты - www.ximicat.com/ebook.php?file=bender_bio.djv&page=56

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Биокоординационная химия" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Компьютерный проектор

Система интерактивного опроса.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Химия супрамолекулярных нано- и биосистем .

Автор(ы):

Улахович Н.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Девятов Ф.В. _____

"__" _____ 201__ г.