

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

Межмолекулярные взаимодействия в нано- и биосистемах Б1.В.ОД.3

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Стойков И.И.

Рецензент(ы):

Антипин И.С.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

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 7135817

Казань
2017

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) Стойков И.И. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Ivan.Stoikov@mail.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины 'Межмолекулярные взаимодействия в нано- и биосистемах' является подготовка к научно-исследовательской и педагогической деятельности, связанной с решением задач, стоящих перед современной цивилизацией при проведении исследований в области органической и физической химии, молекулярной биологии, биохимии, биотехнологии, а также смежных областях, включая фармацевтику и нанотехнологии. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о современных концепциях теоретической супрамолекулярной химии, о принципах конструирования и функционирования синтетических рецепторов, супермолекул и супрамолекулярных систем, о современных методах синтеза органических соединений, основных путях практического использования супрамолекулярных систем в нанотехнологиях. Кроме того, при освоении дисциплины студенты получают обзорные знания о перспективах развития супрамолекулярной химии в таких областях, как материаловедение, тонкий органический синтез и наноструктурированные материалы.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.3 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел ' Б1.В.ОД.3 Профессиональный' образовательной программы магистратуры Химия супрамолекулярных нано- и биосистем. Осваивается на 2 курсе, 1 семестре магистратуры. Форма обучения - очная.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ПК-1 (профессиональные компетенции)	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

о типах межмолекулярных взаимодействий, о супермолекуле, супрамолекулярных ассоциатах, современные концепции теоретической супрамолекулярной химии, в том числе концепции молекулярного распознавания, самопроцессов, процессов адаптации и эволюции супрамолекулярных систем.

2. должен уметь:

обсуждать физико-химические и биохимические аспекты функционирования биологических систем с применением понятий и терминов межмолекулярных взаимодействий, ориентироваться в современной литературе и вести дискуссию по химии межмолекулярных взаимодействий в нано- и биосистемах.

3. должен владеть:

навыками творческого обобщения полученных знаний, конкретного и объективного изложения своих знаний в письменной и устной форме, фундаментальными знаниями о специфике поведения вещества в нанометровом размерном диапазоне, понимать механизм возникновения тех или иных типов межмолекулярных взаимодействий.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания на практике

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 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 химию межмолекулярных взаимодействий	3	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественная картина.	3	2	2	0	0	
3.	Тема 3. Расчет межмолекулярных взаимодействий.	3	3	2	0	0	
4.	Тема 4. Химическая связь. Строение молекул	3	4	2	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия. Структура простых кристаллических веществ	3	5	2	0	0	
6.	Тема 6. Молекулярная биология. Репликация ДНК	3	6	0	2	0	Контрольная работа
7.	Тема 7. Структура белков	3	7,8	0	4	0	
8.	Тема 8. Полимерные органические материалы	3	9,10	0	4	0	Контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	Зачет
	Итого			10	10	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Введение в химию межмолекулярных взаимодействий

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Предмет межмолекулярных взаимодействий и его особенности. Краткий исторический обзор. Концепция межатомных потенциалов и адиабатическое приближение. Общая классификация межмолекулярных взаимодействий.

Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественная картина.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Типы межмолекулярных взаимодействий: качественная картина. Прямые электростатические взаимодействия. Общие выражения. Мультипольные моменты. Мультиполь-мультипольное взаимодействие. Резонансное взаимодействие. Поляризационное взаимодействие. Индукционное взаимодействие. Дисперсионные взаимодействия. Обменное взаимодействие. Эффекты запаздывания в дальнедействующих взаимодействиях. Релятивистские (магнитные) взаимодействия. Взаимодействие между макроскопическими телами

Тема 3. Расчет межмолекулярных взаимодействий.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Расчет межмолекулярных взаимодействий. Большие расстояния. Вывод общего выражения для мультипольного разложения оператора кулоновского взаимодействия. Энергия взаимодействия двух атомов в S-состояниях. Дисперсионные и индукционные взаимодействия молекулярных систем. Сходимость мультипольного разложения. Устранение расходимости мультипольного разложения. Промежуточные и малые расстояния. Теория возмущений с учетом электронного обмена. Вариационные методы.

Тема 4. Химическая связь. Строение молекул

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Ковалентная связь. Правило октета. Структуры Льюиса. Геометрия молекул. Модель ОЭПВО. Разделение движения ядер и электронов. Адиабатическое приближение. Электронные состояния молекул Молекулярные орбитали. Метод МО-ЛКАО Гибридизация АО

Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия. Структура простых кристаллических веществ

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Межмолекулярные взаимодействия. Водородная связь. Классификация кристаллических тел. Плотнейшие и плотные кристаллические упаковки. Структуры металлов, полиморфизм. Энергетические зоны в кристаллах. Структура некоторых простых веществ-неметаллов

Тема 6. Молекулярная биология. Репликация ДНК

практическое занятие (2 часа(ов)):

Консервативная модель. Полуконсервативная модель. Дисперсионная модель. ДНК полимераз

Тема 7. Структура белков

практическое занятие (4 часа(ов)):

Значение. Исторический аспект. Классификация белков. Физико-химические свойства. Цвиттер-ионная природа белковой молекулы. Растворимость. Денатурация. Принцип структурно организации белковых молекул. Первичная структура. Вторичная и третичная структуры. Пространственное расположение полипептидной цепи. Спиральные структуры. Структур складчатого листа. Неупорядоченные конформации полипептидной цепи. Третичная структура глобулярных белков. Метод установления пространственной структуры белков. Четвертичная структур.

Тема 8. Полимерные органические материалы

практическое занятие (4 часа(ов)):

Полимеры - высокомолекулярные вещества (гомополимеры), в которые могут быть введены добавки ? стабилизаторы, ингибиторы, пластификаторы, смазки и т. д. Пластмассы - композиционные материалы на основе полимеров, содержащие дисперсные или коротковолокнистые наполнители и пигменты. Полимерные композиционные материалы (ПКМ) являются разновидностью пластмасс. Они отличаются тем, что в них используются не дисперсные, а волокнистые и листовые армирующие наполнители. Физико-химические свойства. Термопластичные полимеры. Термореактивные полимеры. Сополимеры

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
6.	Тема 6. Молекулярная биология. Репликация ДНК	3	6	подготовка к контрольной работе	26	контрольная работа
8.	Тема 8. Полимерные органические материалы	3	9,10	подготовка к контрольной работе	26	контрольная работа
	Итого				52	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Освоение дисциплины осуществляется через использование традиционных (лекции, практические занятия) и инновационных образовательных технологий, активных и интерактивных форм проведения занятий: изложение лекционного материала с элементами диалога, обсуждения, использование мультимедийных программ, подготовка и выступление студентов с докладами на семинарских занятиях по предложенной теме.

Проводится обсуждение актуальных тем, разбор конкретных ситуаций.

Изучение дисциплины включает:

- посещение всех видов аудиторных работ;
- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- работу с источниками Интернет;
- подготовку к различным формам контроля (контрольной работы);

- подготовка к итоговой форме контроля - зачет.

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

Тема 1. Введение в химию межмолекулярных взаимодействий

Тема 2. Типы межмолекулярных взаимодействий: качественная картина.

Тема 3. Расчет межмолекулярных взаимодействий.

Тема 4. Химическая связь. Строение молекул

Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия. Структура простых кристаллических веществ

Тема 6. Молекулярная биология. Репликация ДНК

контрольная работа , примерные вопросы:

Варианты билетов для контрольной работы 1 Билет 1 1. Важнейшие достижения молекулярной биологии. Доказательство генетической роли нуклеиновых кислот. 2. Современные теоретические и практические задачи молекулярной биологии. Билет 2 1. Принципы строения ДНК. 2. Структура хроматина. Полиморфизм ДНК. Билет 3 1. Репликация различных ДНК и ее регуляция. 2. Теломерные последовательности ДНК. Билет 4 1. Механизм действия теломеразы. Теломераза и старение. 2. Повреждения и репарация ДНК. Повреждения оснований. Повреждения цепей ДНК.

Тема 7. Структура белков

Тема 8. Полимерные органические материалы

контрольная работа , примерные вопросы:

Варианты билетов для контрольной работы 2 Билет 1. 1. Каковы отличительные особенности химических реакций полимеров с реакциями низкомолекулярных соединений? 2. Ориентированное состояние полимеров. Способы ориентации полимеров. 3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях. 4. Причины влияния среды на конформации молекул. 5. Основные методы исследования водородных связей. Билет 2. 1. Охарактеризуйте влияние различных факторов на химические реакции полимеров. 2. Стеклообразное состояние полимеров. Понятие стеклообразного состояния. 3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях. 4. Причины влияния среды на конформации молекул. 5. В чем проявляется существование ван-дер-ваальсовых взаимодействий? Билет 3. 1. Охарактеризуйте влияние различных факторов на химические реакции полимеров. 2. Стеклообразное состояние полимеров. Понятие стеклообразного состояния. 3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях. 4. Причины влияния среды на конформации молекул. 5. ЯМР в исследовании супрамолекулярных соединений. Быстрый и медленный обмен. Билет 4. 1. Охарактеризуйте влияние различных факторов на химические реакции полимеров. 2. Стеклообразное состояние полимеров. Понятие стеклообразного состояния. 3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях. 4. Причины влияния среды на конформации молекул. 5. Методы исследования структуры биополимеров.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Примеры билетов для экзамена:

Билет 1.

1. Назначение и основные типы полимераналогичных превращений полимеров.

2. Адгезия полимеров. Термодинамические аспекты и работа адгезии.
3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях.
4. Причины влияния среды на конформации молекул.
5. В чем проявляется существование ван-дер-ваальсовых взаимодействий?

Билет 2.

1. Какие реакции могут приводить к сшиванию макромолекул?
2. Надмолекулярная структура полимеров. Факторы, влияющие на макроконформацию цепи.
3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях.
4. Причины влияния среды на конформации молекул.
5. ЯМР в исследовании супрамолекулярных соединений. Быстрый и медленный обмен.

Билет 3.

1. Какие реакции могут приводить к отверждению полимеров и как при этом изменяются их свойства?
2. Кристаллизация полимеров. Основные стадии кристаллизации. Полиморфизм.
3. Основные виды межмолекулярных взаимодействий: ранжирование по энергии, дальное действие (зависимость от расстояния), направленность, примеры в супрамолекулярных ансамблях.
4. Причины влияния среды на конформации молекул.
5. Методы исследования структуры биополимеров.

7.1. Основная литература:

Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. [Электронный ресурс] ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. ? 397 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66358> ? Загл. с экрана.

Нельсон, Д. Основы биохимии Ленинджера в 3 т. Т. 2 : Биоэнергетика и метаболизм. [Электронный ресурс] / Д. Нельсон, М. Кокс. ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 693 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/90237> ? Загл. с экрана.

Нельсон, Д. Основы биохимии Ленинджера в 3 т. Т. 3 : Пути передачи информации. [Электронный ресурс] / Д. Нельсон, М. Кокс. ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 455 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/90236> ? Загл. с экрана.

Нельсон, Д. Основы биохимии Ленинджера в 3 т. Т. 1 : Основы биохимии, строение и катализ. [Электронный ресурс] / Д. Нельсон, М. Кокс. ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 751 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/90238> ? Загл. с экрана.

7.2. Дополнительная литература:

1. Ребриков, Д.В. ПЦР в реальном времени. [Электронный ресурс] / Д.В. Ребриков, Г.А. Саматов, Д.Ю. Трофимов, П.А. Семёнов. ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. ? 226 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/70781> ? Загл. с экрана.
2. Степанов, В.М. Молекулярная биология, структура и функция белков. [Электронный ресурс] ? Электрон. дан. ? М. : МГУ имени М.В.Ломоносова, 2005. ? 336 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/10123> ? Загл. с экрана.

3. Кэри, Н. Мусорная ДНК. Путешествие в темную материю генома. [Электронный ресурс] ? Электрон. дан. ? М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2016. ? 339 с. ? Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/90247> ? Загл. с экрана.

7.3. Интернет-ресурсы:

Meduniver Биология - <http://meduniver.com/>

Биохимия - <http://biochemistry.ru/>

Википедия - <https://ru.wikipedia.org>

Издательство Лань - <https://e.lanbook.com>

Chemport - <http://www.chemport.ru/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Межмолекулярные взаимодействия в нано- и биосистемах" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Мультимедийная аудитория

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):

Стойков И.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.