


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

 А. С. Князев

« 16 » августа 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Молекулярный инжиниринг

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки :

Трансляционные химические и биомедицинские технологии

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр


Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: ФТД.04

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 И.А. Курзина

Председатель УМК

 В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских и/или производственных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках;
- ПК-3. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий;

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов;

ИПК-1.3. Использует современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования;

ИПК 3.1. Анализирует имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагает технические средства для решения поставленных задач;

ИПК 3.2. Производит оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов.

2. Задачи освоения дисциплины

- ознакомить магистрантов с методами проведения испытаний технологических и функциональных свойств наноструктурированных композиционных материалов;
- ознакомить с принципами построения программ молекулярного моделирования на примерах доступных программных комплексов;
- сформировать навыки работы со структурными базами данных;
- научиться анализировать результаты теоретических расчетов и определять оптимальные технологические параметры процесса производства.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к факультативной части образовательной программы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 3, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Физика», «Квантовая химия», «Физическая химия», «Органическая химия», «Строение вещества», полученные в рамках обучения по программе бакалавриата или специалитета.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 з.е., 36 часов, из которых:

– лекции: 12 ч.;

– практические занятия: 20 ч.;

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Общие тенденции развития современной химии. Концепции современной химии и их практическое применение.

Тема 2. Основные направления развития химии в XXI веке. Химия как фундаментальная наука. Развивающиеся современные направления: компьютерная химия, компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций; спиновая химия; синтез и исследование наноструктур, развитие и применение нанотехнологий; синтез полимерных полупроводников; химия чрезвычайно быстротекущих реакций (фемтохимия); синтез фуллеренов и нанотрубок; развитие химии одиночной молекулы; развитие электроники на молекулярном уровне; создание «молекулярных машин»; электровзрывная активация пульпы и растворов.

Тема 3. Прогресс науки и роль «зеленой химии» в современном мире. «Зелёная химия» в России. 12 принципов «Зелёной химии». Анализ технологии производства с использованием принципов «Зелёной химии». Основные направления в развитии технологий «Зелёной химии». Общие подходы к оценке эффективности проведения процессов с точки зрения зеленой химии.

Тема 4. Химия и наступающая эра нанотехнологий. Разработка новых наноматериалов. Разработка методов сборки крупных молекул из атомов с помощью наноманипуляторов. Получение новых нанокатализаторов для химической и нефтехимической промышленности. Изучение механизма каталитических реакций на нанокристаллах. Исследование явления самоорганизации в коллективах нанокристаллов. Поиск новых способов пролонгирования стабилизации наноструктур химическими модификаторами.

Тема 5. Суперкритические флюидные технологии в химии природных соединений. Основные области практического использования сверхкритических веществ. Развитие суб- и суперкритических жидкостных технологий для процессов экстракции и химического синтеза. Сверхкритические среды в экстракционных процессах.

Тема 6. Теоретическое моделирование и компьютерный дизайн новых молекулярных и наноразмерных структур. Перспективы использования компьютерного моделирования в области нанотехнологий. Развитие теории и методов теоретического моделирования неклассических молекулярных систем и механизмов химических реакций, молекулярный дизайн новых структурных мотивов для высокотехнологичных материалов, молекулярных и супрамолекулярных актуаторов, молекулярных машин.

Тема 7. Компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций.

Основные направлениями компьютерной химии: создание принципиально новых компьютерных программ поиска и отбор новых эффективных веществ; количественный анализ связи структура-активность для широкого спектра ФАВ. Молекулярный дизайн макромолекулы с управляемыми биологическими функциями.

Тема 8. Спиновая химия. Молекулярная электроника и спинтроника. На пути к созданию молекулярного компьютера. Дизайн молекулярных магнетиков.

Тема 9. Хемосенсорика. Новое направление органической, аналитической и координационной химии. Молекулярная электроника, фотоника и хемосенсорика. Направленный синтез, фото- и магнетохимия бистабильных органических и металлоорганических структур для молекулярных переключателей и сред трехмерной оптической памяти.

Тема 10. Органические и элементоорганические соединения для светоизлучающих диодов. Основные характеристики электролюминесцентных устройств на основе органических соединений. Светоизлучающие диоды на основе органолантаноидов. Светоизлучающие диоды на основе смешанных (3-дикетонатных) комплексов. Светоизлучающие диоды на основе комплексов редкоземельных элементов, содержащих хинолинолятные лиганды.

Тема 11. Протеомика. Проблема трансформации здоровой клетки в раковую. Создание современных липосомальных противоопухолевых препаратов. Иммунизация противоопухолевых средств на носителе.

Тема 12. Масс-спектрометрия в органической химии и биохимии. Использование масс-спектрометрии в органической химии. Использование масс-спектрометрии в биохимии

Тема 13. Органические фотохромные соединения: структурный дизайн и практические применения. Разнообразие фотохромных соединений и систем. Особенности применения фотохромных соединений и материалов. Принципы дизайна оптических молекулярных сенсоров и фотоуправляемых рецепторов на основе краун-эфиров. Фотохромные спиропираны и объекты биологического мира

Тема 14. Современные приложения спектроскопии ЯМР. Импульсный двойной электрон-электронный резонанс - спектроскопия ЭПР в нанометровом диапазоне расстояний. Современные возможности ЯМР-спектроскопии твердого тела квадрупольных ядер с полуцелым спином. Методики определения ЯМР параметров, корреляции со структурными параметрами. Исследование процесса приготовления нанесенных катализаторов методом ЯМР томографии

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости и оценивания отчетов по выполненным практическим работам, сдаче реферата и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. При выполнении всех практических заданий студент допускается к сдаче зачета.

Тематика рефератов:

1. Процессы получения наночастиц и наноматериалов.
2. Химия одиночной молекулы.
3. История создания сканирующего туннельного микроскопа.
4. Область изучения фемтохимии.
5. Нанокатализаторы.
6. Экологический катализ: достижения и перспективы.
7. Методы зеленой химии в получении целлюлозы.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в форме зачета, который оцениваются по шкале «зачет/незачет».

«Зачтено»: присутствуют ответы на все вопросы либо в краткой форме, либо большинство вопросов раскрыты полностью с привлечением дополнительных знаний, полученных при самостоятельной работе студента.

«Не зачтено»: нет ответа на вопросы или ответы даны менее чем на 30 процентов вопросов, студент не способен ответить на вопросы билета даже при дополнительных наводящих вопросах экзаменатора

Примерные вопросы для проведения зачета:

1. Общие тенденции развития современной химии.
2. Основные направления развития химии в XXI.
3. Прогресс науки и роль «зеленой химии» в современном мире.
4. 12 принципов «Зелёной химии».
5. Основные направления в развитии технологий «Зелёной химии»
6. Химия и наступающая эра нанотехнологий.
7. Один из принципов зеленой химии – атомная эффективность.
8. E-фактора для различных типов химических процессов.
9. Расчёт атомной эффективности для химических производств.
10. Принципы энергоэффективности.
11. Использование локальных источников энергии для активации молекул.
12. Цеолиты и мезопористые катализаторы.
13. Катализ энзимами (ферментами), в том числе закрепленными (гетерогенизированными).
14. Закрепление гомогенных катализаторов на носителе.
15. Катализ наночастицами.
16. Что такое сверхкритический флюид?
17. Реакции в сверхкритическом CO₂.
18. Реакции метатезиса олефинов

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению практических занятий.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Ибрагимов И. М., Назаров Ю. Ф., Ковшов А. Н. Основы компьютерного моделирования наносистем. Москва Лань, 2010. 376 с.
 - Илюшин Г.Д. Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Рос. акад. наук, Ин-т кристаллографии им. А. В. Шубникова. Москва Едиториал УРСС, 2003. 356 с.
 - Супрамолекулярная химия : в 2 т. /Дж. В. Стивд, Дж. Л. Этвуд ; пер. с англ. И. Г. Варшавской и др. ; под ред. А. Ю. Цивадзе. М. Академкнига, 2007.
 - Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие : [для студентов высших учебных заведений, обучающихся по

химико-технологическим направлениям и специальностям] / В. Г. Цирельсон. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 495 с.

– Бейдер Р. Атомы в молекулах : Квантовая теория / Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др. ; Под ред. М. Ю. Антипина. - М. : Мир, 2001. 532 с.

б) дополнительная литература:

– Соловьев М.Е. Компьютерная химия. М. : ООО «СОЛОН-ПРЕСС», 2005. – 536 с.

– Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии : материалы XLVII международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс», 12-15 апреля 2009 г. Сиб. отд-ние Рос. акад. наук, Новосиб. гос. ун-т.

– Методические указания к лабораторным работам по компьютерному моделированию химических реакций Электронный ресурс. О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер. Том. гос. пед. ун-т.

– Бронштейн М. П. Строение вещества / М. П. Бронштейн. - Ленинград [и др.] : ОНТИ, 1935. 243 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– Научный журнал «Journal of Chemical information and modeling» – <https://pubs.acs.org/journal/jcisd8>

– Научный журнал «Molecular informatics» – <https://onlinelibrary.wiley.com/journal/18681751>

– Электронный учебный курс «Everything you need to get started in medical billing & coding» – <https://www.medicalbillingandcoding.org/what-is-mbac/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standard 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office Onenote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

– Поискковая система по научным публикациям «Google Scholar» – <https://scholar.google.com/>

в) профессиональные базы данных:

– База данных «Protein Data Bank» – <http://www.rcsb.org>

– Спектральная база данных органических соединений «SDBS» – https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi

– База данных по рассчитанной квантово-химическими методами геометрии соединений «Computational Chemistry Comparison and Benchmark» – <https://cccbdb.nist.gov/geom1x.asp>

– База данных «Термические Константы Веществ» – <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Павловский Виктор Иванович, д.х.н., кафедра природных соединений, фармацевтической и медицинской химии ХФ ТГУ, профессор.

Курзина Ирина Александровна, д.ф.-м.н., доцент, кафедра природных соединений, фармацевтической и медицинской химии ХФ ТГУ, заведующий кафедрой.